



REC'D	12 APR 2005
WIPO	PCT

# BREVET D'INVENTION

## CERTIFICAT D'UTILITÉ - CERTIFICAT D'ADDITION

### COPIE OFFICIELLE

Le Directeur général de l'Institut national de la propriété industrielle certifie que le document ci-annexé est la copie certifiée conforme d'une demande de titre de propriété industrielle déposée à l'Institut.

Fait à Paris, le 03 MARS 2005

Pour le Directeur général de l'Institut  
national de la propriété industrielle  
Le Chef du Département des brevets

A handwritten signature in black ink, enclosed in an oval, which appears to read 'Martine PLANCHE'.

Martine PLANCHE

#### DOCUMENT DE PRIORITÉ

PRÉSENTÉ OU TRANSMIS  
CONFORMÉMENT À LA  
RÈGLE 17.1.a) OU b)

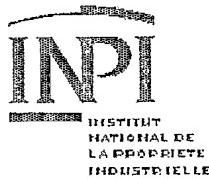
INSTITUT  
NATIONAL DE  
LA PROPRIÉTÉ  
INDUSTRIELLE

ETABLISSEMENT PUBLIC NATIONAL

SIEGE  
26 bis, rue de Saint-Petersbourg  
75800 PARIS cedex 08  
Téléphone : 33 (0)1 53 04 53 04  
Télécopie : 33 (0)1 53 04 45 23  
[www.inpi.fr](http://www.inpi.fr)

CRÉÉ PAR LA LOI N° 51-444 DU 19 AVRIL 1951





## BREVET D'INVENTION CERTIFICAT D'UTILITE

26bis, rue de Saint-Pétersbourg  
75800 Paris Cédex 08  
Téléphone: 01 53.04.53.04 Télécopie: 01.42.94.86.54

Code de la propriété intellectuelle-livreVI

### REQUÊTE EN DÉLIVRANCE

DATE DE REMISE DES PIÈCES: N° D'ENREGISTREMENT NATIONAL: DÉPARTEMENT DE DÉPÔT: DATE DE DÉPÔT:	Pascale LE COUPANEC NONY & ASSOCIES 3 rue de Penthièvre 75008 PARIS France
Vos références pour ce dossier: PR75022/CR/sb	

<b>1 NATURE DE LA DEMANDE</b>		
Demande de brevet		
<b>2 TITRE DE L'INVENTION</b>		
	Procédé permettant d'identifier rapidement un ou plusieurs catalyseurs utilisables pour la transformation d'un composé.	
<b>3 DECLARATION DE PRIORITE OU REQUETE DU BENEFICE DE LA DATE DE DEPOT D'UNE DEMANDE ANTERIEURE FRANCAISE</b>	Pays ou organisation	Date
<b>4-1 DEMANDEUR</b>		
Nom	NOVALYST DISCOVERY	
Rue	23 rue du Loess	
Code postal et ville	67200 STRASBOURG	
Pays	France	
Nationalité	France	
Forme juridique	Société par actions simplifiée (SAS)	
N° SIREN	444 361 851	
<b>5A MANDATAIRE</b>		
Nom	LE COUPANEC	
Prénom	Pascale	
Qualité	CPI: 98-0402, Pas de pouvoir	
Cabinet ou Société	NONY & ASSOCIES	
Rue	3 rue de Penthièvre	
Code postal et ville	75008 PARIS	
N° de téléphone	01 43 12 84 60	
N° de télécopie	01 43 12 84 70	
Courrier électronique	nony@nony.fr	
<b>6 DOCUMENTS ET FICHIERS JOINTS</b>		
Texte du brevet	Fichier électronique	Pages
Dessins	textebrevet.pdf	27
	dessins.pdf	8
		Détails
		D 22, R 4, AB 1
		page 8, figures 19

## 1er dépôt

2

**7 MODE DE PAIEMENT**

Mode de paiement	Prélèvement du compte courant
Numeréro du compte client	1713

**8 RAPPORT DE RECHERCHE**

Etablissement immédiat

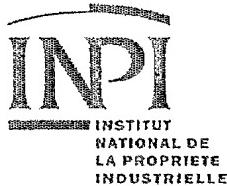
**9 REDEVANCES JOINTES**

	Devise	Taux	Quantité	Montant à payer
062 Dépôt	EURO	0.00	1.00	0.00
063 Rapport de recherche (R.R.)	EURO	320.00	1.00	320.00
068 Revendication à partir de la 11ème	EURO	15.00	7.00	105.00
Total à acquitter	EURO			425.00

La loi n°78-17 du 6 janvier 1978 relative à l'informatique aux fichiers et aux libertés s'applique aux réponses faites à ce formulaire.  
 Elle garantit un droit d'accès et de rectification pour les données vous concernant auprès de l'INPI.

Signé par

Signataire: FR, Cabinet Nony et Autre, F.Tanty  
 Emetteur du certificat: DE, D-Trust GmbH, D-Trust for EPO 2.0  
 Fonction  
 NOVALYST DISCOVERY (Demandeur 1)



# BREVET D'INVENTION CERTIFICAT D'UTILITE

## Réception électronique d'une soumission

Il est certifié par la présente qu'une demande de brevet (ou de certificat d'utilité) a été reçue par le biais du dépôt électronique sécurisé de l'INPI. Après réception, un numéro d'enregistrement et une date de réception ont été attribués automatiquement.

Demande de brevet : X  
Demande de CU :

<b>DATE DE RECEPTION</b>	30 janvier 2004	
<b>TYPE DE DEPOT</b>	INPI (PARIS) - Dépôt électronique	Dépôt en ligne: X Dépôt sur support CD:
<b>N° D'ENREGISTREMENT NATIONAL ATTRIBUE PAR L'INPI</b>	0450178	
<b>Vos références pour ce dossier</b>	PR75022/CR/sb	

### DEMANDEUR

Nom ou dénomination sociale	NOVALYST DISCOVERY
Nombre de demandeur(s)	1
Pays	FR

### TITRE DE L'INVENTION

Procédé permettant d'identifier rapidement un ou plusieurs catalyseurs utilisables pour la transformation d'un composé.

### DOCUMENTS ENVOYES

package-data.xml	Requetefr.PDF	fee-sheet.xml
Design.PDF	ValidLog.PDF	textebrevet.pdf
FR-office-specific-info.xml	application-body.xml	request.xml
dessins.pdf	indication-bio-deposit.xml	

### EFFECTUE PAR

Effectué par:	F.Tanty
Date et heure de réception électronique:	30 janvier 2004 15:39:17
Empreinte officielle du dépôt	F1:2D:E8:F0:63:86:CF:3D:DF:37:03:B9:6D:F6:D7:0F:5F:21:6D:DA

/ INPI PARIS, Section Dépôt /

SIEGE SOCIAL  
 INSTITUT 26 bis, rue du Saint Petersbourg  
 NATIONAL DE 75000 PARIS cedex 08  
 LA PROPRIETE Téléphone : 01 53 04 53 04  
 INDUSTRIELLE Télécopie : 01 42 93 59 30

La présente invention concerne le domaine de la catalyse et vise notamment à proposer un procédé et un dispositif permettant d'identifier rapidement un ou plusieurs catalyseurs utilisables pour la transformation d'un composé et plus particulièrement d'au moins l'un de ses motifs réactionnels, selon une réaction chimique donnée.

La synthèse organique par voie catalytique, et notamment par catalyse hétérogène, est une voie de synthèse particulièrement appréciée au niveau industriel. En effet, l'utilisation d'un catalyseur permet généralement d'accélérer la vitesse d'une réaction, d'abaisser la température réactionnelle et/ou d'en augmenter le rendement. De plus, les catalyseurs hétérogènes, c'est-à-dire insolubles dans le milieu réactionnel par opposition aux catalyseurs dits homogènes, ont pour avantage significatif d'être facilement séparés des produits de réaction, à l'issue de la réaction chimique considérée.

Malheureusement, on ne dispose pas, à ce jour, d'un moyen simple et rapide pour identifier le ou les catalyseur(s) susceptible(s) de manifester la meilleure sélectivité et/ou efficacité pour une réaction chimique donnée. L'identification de ce type de catalyseur relève d'une démarche très souvent empirique.

Classiquement, un catalyseur présumé efficace est testé en tant que tel et, en fonction du résultat obtenu, différentes possibilités sont envisageables. Notamment, dans le cas particulier où le catalyseur ne donne pas satisfaction soit il peut être abandonné et un autre catalyseur testé, soit il peut faire l'objet de modifications de manière à optimiser sa réactivité. Enfin, les conditions opérationnelles retenues peuvent être également modifiées. Cette approche est bien entendu consommatrice de temps et donc coûteuse.

Une alternative consiste à mettre à profit la chimie dite combinatoire. Selon cette approche, un grand nombre de variants chimiques d'un catalyseur présumé efficace pour une réaction donnée est synthétisé et testé pour caractériser le ou les catalyseurs les plus efficaces pour réaliser la réaction. Toutefois, cette seconde approche n'est pas entièrement satisfaisante. Elle implique notamment de tester, pour chaque nouveau composé à transformer, l'ensemble des catalyseurs et de constituer une nouvelle librairie de catalyseurs pour chaque nouvelle réaction chimique envisagée. En effet, la réactivité des catalyseurs n'est généralement pas archivée et encore moins corrélée à une structure particulière des composés intervenant dans la réaction considérée et/ou à des conditions réactionnelles définies. Or, on sait que pour un catalyseur donné, plusieurs degrés de

réactivité sont susceptibles d'exister selon d'une part la structure des composés à transformer et, d'autre part, le milieu et les conditions réactionnelles retenus.

La présente invention vise notamment à proposer un procédé permettant d'identifier rapidement au moins un catalyseur répondant à une requête réactionnelle.

5 La présente invention a pour objet, selon l'un de ses aspects, un procédé pour délivrer au moins une information relative à la réactivité d'un catalyseur vis-à-vis d'une transformation chimique d'au moins un motif réactionnel, ce procédé pouvant se caractériser en ce qu'il comprend au moins les étapes consistant à :

10 a) acquérir des données relatives à ladite transformation et, le cas échéant, à l'environnement structurel du motif réactionnel à transformer,

b) identifier dans une base de données renseignant sur la réactivité d'un ensemble de catalyseurs vis-à-vis de motifs réactionnels répertoriés dans la base de données et présents sur des sondes de réactivité, au moins un motif réactionnel répertorié apparenté au motif à transformer,

15 c) sélectionner dans la base de données en fonction d'une part du motif réactionnel répertorié ainsi identifié et d'autre part de la transformation à effectuer au moins un catalyseur ayant la réactivité requise pour la transformation.

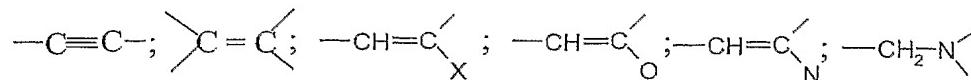
On désigne par « motif réactionnel » un motif présentant au moins une fonction ou liaison susceptible d'être transformée chimiquement.

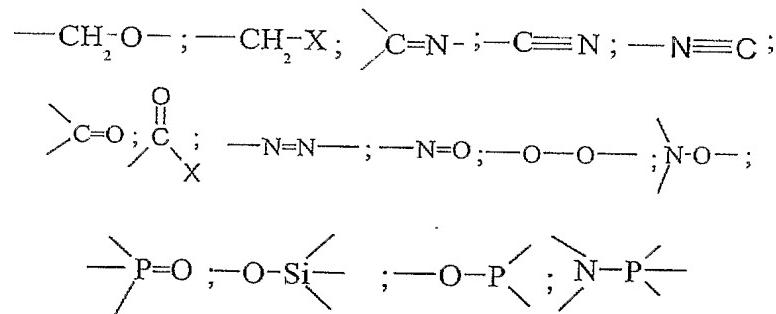
20 Ce motif peut notamment être constitué par une liaison saturée d'un atome de carbone avec au moins un atome d'halogène et/ou un hétéroatome, ou une liaison insaturée entre deux atomes de carbone, entre un atome de carbone et au moins un hétéroatome ou entre deux hétéroatomes, identiques ou différents.

25 Les liaisons insaturées entre deux atomes de carbone peuvent être par exemple des liaisons hydrocarbonées C<sub>sp</sub> de type alcynique, ou C<sub>sp2</sub> de type alcénique.

Au sens de la présente invention, on entend couvrir sous le terme de « hétéroatome », un atome d'azote, d'oxygène, de soufre, de phosphore, d'un halogène, de silicium.

30 A titre représentatif et non limitatif de motifs réactionnels, on peut notamment citer les motifs suivants :





avec X représentant un atome d'halogène.

5 La base de données peut contenir pour chaque catalyseur répertorié des informations concernant le milieu réactionnel dans lequel il a été testé pour son activité catalytique.

Au moins pour une partie des motifs réactionnels répertoriés dans la base de données, sont associées à chaque motif réactionnel répertorié des informations visant à 10 qualifier l'état des liaisons qui sont susceptibles de lui être associées. Il est important de noter que l'état des liaisons ne présage en rien de leur réactivité. Ainsi, celle-ci n'est pas identique dans un milieu réducteur ou oxydant. Plus précisément, l'état d'un motif réactionnel peut être indexé à l'aide d'un chiffre entier, dit état des liaisons et pouvant varier de 0 à 3, avec la valeur zéro qualifiant généralement l'absence de liaison et la valeur 15 2 caractérisant une double liaison.

En conséquence de quoi, chaque couple motif réactionnel/milieu réactionnel peut être associé à un couple d'états des liaisons visant à qualifier le degré de réactivité dudit motif avant et après son exposition audit milieu réactionnel.

Par exemple, en cas de non réaction, l'état des liaisons reste le même ; en cas 20 de réduction, l'état des liaisons diminue d'au moins une unité (un état égal à zéro signifie généralement la rupture d'une liaison). Une diminution d'une unité peut correspondre par exemple à la transformation d'une triple liaison en une double liaison ou d'une double liaison en une liaison simple ou encore du remplacement d'un halogène par un hydrogène.

Par « motif réactionnel répertorié apparenté au motif à transformer », il faut 25 comprendre que le motif réactionnel répertorié dans la base de données est identique au motif réactionnel à transformer ou suffisamment proche sur le plan structurel pour que l'on puisse penser que le catalyseur qui sera sélectionné est utile pour la transformation à effectuer.

Par « environnement structurel », on désigne l'environnement résultant de la combinaison et de l'arrangement spatial de l'ensemble des motifs réactionnels constituant une même entité moléculaire.

La réactivité d'un motif réactionnel est susceptible de varier significativement 5 selon qu'il possède ou non dans son environnement structurel immédiat, d'autres motifs réactionnels. Par exemple, une fonction éthylénique, selon qu'elle est disposée en  $\alpha$  d'une fonction cétonique ou d'un motif méthylène, ne manifestera pas le même degré de réactivité lors d'une réaction d'hydrogénéation catalytique ou d'addition nucléophile.

La base de données peut contenir des informations qui renseignent sur 10 l'influence de l'environnement structurel d'un motif réactionnel répertorié.

L'appartenance des motifs réactionnels répertoriés à des sondes de réactivité pouvant comporter plusieurs motifs réactionnels permet de prendre en considération, le cas échéant, l'aspect « influence réactionnelle » pour la sélection des catalyseurs, c'est-à-dire 15 l'influence subie par un motif réactionnel en terme de réactivité, du fait de son environnement structurel associé.

Par définition, une réaction a pour objectif de transformer, assembler et/ou dissocier un ou plusieurs motifs réactionnels d'un composé sans, le cas échéant, modifier d'autres motifs également présents. Les expressions « transformation chimique » et « réaction chimique » englobent non seulement la chimie dite conventionnelle, mais 20 également la biochimie, et la transformation ou réaction peut être biologique.

D'une manière générale, les réactions chimiques pouvant intervenir dans les milieux réactionnels sont des réactions de formation ou de rupture de liaisons, notamment  $C - C$  ;  $C - O$  ;  $C - N$  ;  $C = N$  ou  $C = C$ .

A titre représentatif et non limitatif de réactions chimiques, on peut notamment 25 citer les réactions d'halogénéation, de réduction, d'hydrogénéation, notamment par voie catalytique hétérogène, d'oxydation, d'hydrolyse, de déshydratation et d'estérification.

Les réactions considérées selon l'invention peuvent ainsi être des réactions catalytiques acides comme par exemple des réactions de protection/déprotection, des réactions catalytiques basiques, des réactions multicomposants métallocatalysées, des 30 réactions de trimérisation, de formation d'hétérocycle par exemple.

Par « transformation », on désigne une réaction localisée au niveau d'un motif réactionnel. Ce terme englobe tout type de transformation, assemblage ou dissociation,

dans la mesure où elle est localisée au niveau d'un motif réactionnel. La transformation d'un motif réactionnel peut résider dans la formation d'un couplage de deux motifs réactionnels identiques ou différents.

A titre illustratif de transformations susceptibles d'avoir lieu dans une réaction 5 d'hydrogénéation, on peut notamment citer les transformations suivantes : réduction d'imine en amine, coupure d'une liaison C-N ou C-O benzylique, réduction d'un halogénure, d'une fonction nitro en amine, d'un nitrile en amine, réduction d'amide, réduction d'un motif alcynique, réduction d'une cétone en alcool, réduction d'une cétone en alcane et coupure d'un motif éther.

10 L'acquisition à l'étape a) peut être, par exemple, une saisie à l'aide d'un clavier ou d'une tablette graphique ou la réception de données, par exemple un fichier.

Dans ce qui suit, on utilisera indépendamment le terme saisi ou acquisition.

15 La saisie des données à l'étape a) ci-dessus peut comporter la formulation d'une requête mentionnant le motif réactionnel concerné et la nature de la transformation que l'on souhaite lui faire subir.

20 La transformation peut être formulée en utilisant le nom de la transformation, par exemple en la sélectionnant dans une liste figurant sur un menu déroulant. La transformation peut également être formulée en indiquant la variation de l'état des liaisons des groupements fonctionnels à transformer ou à conserver au niveau de chaque motif réactionnel issu de la transformation ou la différence de l'état des liaisons dans le motif réactionnel considéré entre les états avant et après transformation.

25 Le cas échéant, la saisie des données peut comporter la formulation d'une requête concernant la transformation et/ou la non transformation d'au moins deux motifs réactionnels différents.

30 Dans le cas par exemple d'un premier motif réactionnel à transformer et d'un second motif réactionnel à ne pas transformer, ces premiers et second motifs réactionnels étant présents sur un composé de départ, la requête peut viser à sélectionner un catalyseur capable d'effectuer la transformation du premier motif avec un rendement suffisant tout en laissant le deuxième intact, ou à tout le moins en le transformant suffisamment peu.

30 La saisie des données à l'étape a) peut encore s'effectuer en formulant une requête de transformation d'au moins un composé de départ.

Dans ce cas, le procédé peut comporter l'analyse des composés de départ et d'arrivée en vue d'identifier le ou les motifs réactionnels réagissant et celui ou ceux ne réagissant pas. Au vu de ce ou ces motifs réactionnels réagissant et/ou ne réagissant pas, au moins une nouvelle requête portant sur au moins un motif réactionnel du composé de 5 départ peut être formulée. Cette requête peut le cas échéant être formulée de manière automatique, de même que l'analyse précitée peut être effectuée sans l'intervention de l'utilisateur si ce n'est pour valider, le cas échéant, l'analyse effectuée de façon automatique.

Ainsi, le procédé selon l'invention peut impliquer :

- 10 - la décomposition d'un composé de départ intervenant dans une réaction en différentes sous-structures,
- l'identification du ou des motifs réactionnels à transformer et, le cas échéant,
- l'identification du ou des motifs réactionnels devant être préservé(s).

15 La saisie du composé de départ et du composé d'arrivée peut s'effectuer par exemple en dessinant leur structure, en donnant leur nom ou un identifiant renvoyant à leur structure.

La saisie des données à l'étape a) peut s'effectuer par l'intermédiaire d'un réseau informatique, notamment Internet ou Intranet. Dans cette hypothèse, l'intervention 20 de l'utilisateur peut par exemple se limiter à préciser l'identité des composés de départ et d'arrivée.

Comme indiqué ci-dessus, une pluralité de motifs réactionnels répertoriés dans la base de données sont présents sur des sondes de réactivité. Les sondes de réactivité utilisées peuvent être plus particulièrement adaptées à un type de réaction donné.

25 Au moins certaines données de réaction enregistrées dans la base de données ont été acquises en faisant réagir les sondes de réactivité. Ces dernières possèdent dans leur structure au moins un motif réactionnel susceptible d'être transformé selon une réaction chimique catalytique, ce motif réactionnel étant par exemple choisi parmi ceux cités précédemment.

30 Les sondes de réactivité peuvent être naturelles ou synthétiques. Il peut notamment s'agir de molécules hydrocarbonées de faible masse et pouvant comprendre de

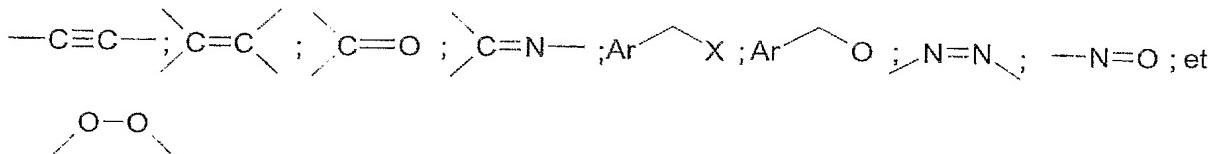
10 à 30 atomes de carbone. Elles peuvent être saturées ou insaturées, linéaires ou ramifiées.

D'une manière générale, chaque sonde de réactivité comprend au moins un motif réactionnel dans un environnement structurel spécifique. Elles comprennent 5 avantageusement au moins deux motifs réactionnels différents ou au moins trois motifs réactionnels dont au moins deux motifs différents ou encore au moins quatre motifs réactionnels, dont au moins deux, voire au moins trois motifs différents.

La présence de plusieurs motifs réactionnels sur une même sonde de réactivité peut permettre d'accroître le nombre de données de réaction acquises à chaque essai de 10 transformation de la sonde dans un milieu réactionnel donné. La base de données peut ainsi être remplie plus rapidement. En outre, la présence de plusieurs motifs réactionnels peut permettre de mettre en évidence, le cas échéant, l'influence de l'environnement structurel.

Les sondes de réactivité utilisées peuvent être plus particulièrement adaptées à un type de réaction donné.

15 Par exemple pour une hydrogénéation catalytique, les sondes peuvent par exemple posséder au moins un motif réactionnel choisi parmi les motifs suivants :

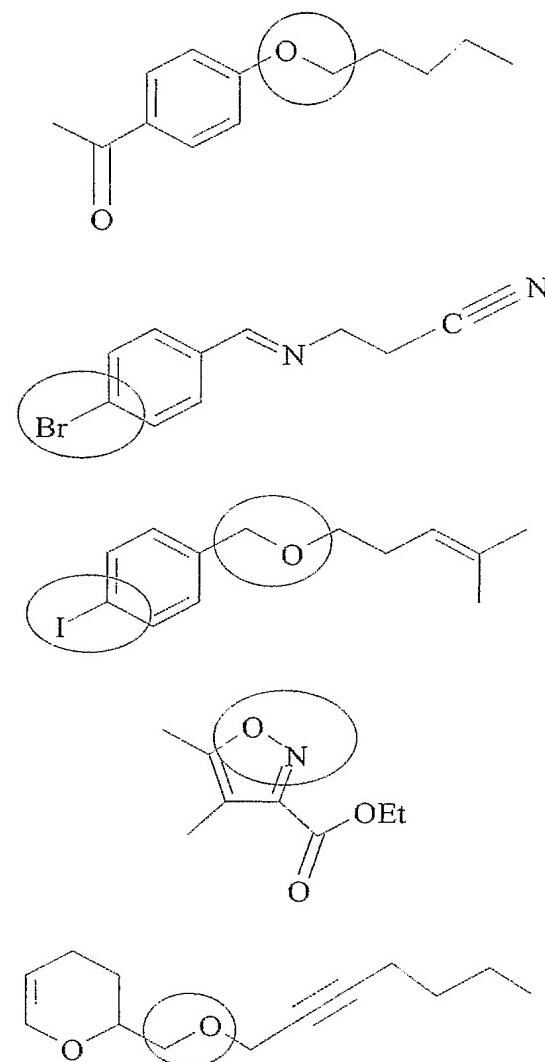


A ce motif fortement réactif, peut être associé au moins un second motif, voire 20 deux autres motifs, connus en revanche pour une réactivité plus faible selon cette même réaction, par exemple un noyau aromatique ou la fonction nitrile d'un hétérocycle. Par exemple, pour une sonde de réactivité donnée, ce seront ces motifs moins réactifs et leur arrangement spatial qui constitueront l'environnement structurel associé au motif réactionnel le plus réactif.

25 Le nombre de sondes est de préférence choisi de manière à figurer l'ensemble des transformations chimiques susceptibles d'intervenir dans une réaction donnée. Par exemple, pour une hydrogénéation pourront être représentées à travers ces sondes les différentes possibilités d'insaturation hydrocarbonées, aromatiques ou non aromatiques, les différentes fonctions carboxylées COOH, CHO, CO, CONH<sub>2</sub>, les fonctions 30 carboimines, ...

A titre illustratif et non limitatif de sondes de réactivité convenant à l'invention, par exemple pour l'évaluation de la réactivité d'un ensemble de catalyseurs vis-à-vis d'une réaction d'hydrogénéation, on peut notamment citer celles possédant les structures représentées ci-dessous :

5



10

La base de données peut en outre contenir des informations, associées à chaque catalyseur et/ou motif réactionnel répertorié, qui peuvent être très diverses et notamment la base de données peut contenir des données qui renseignent sur l'activité d'une partie au moins des catalyseurs répertoriés pour différentes conditions réactionnelles, notamment la température du milieu réactionnel, l'acidité, la pression, la présence de solvants, la méthode d'analyse, etc ...

15

La base de données peut être chargée sur un serveur informatique où peuvent se connecter des ordinateurs par exemple un ordinateur individuel, portable ou fixe. Les données peuvent être enregistrées sur un support informatique.

La présente invention concerne également, selon un autre aspect, un procédé de fourniture d'au moins un catalyseur utilisable pour transformer au moins un motif réactionnel d'au moins un composé selon une réaction chimique donnée, caractérisé en ce qu'il comprend outre les étapes a), b) et c) définies précédemment au moins une étape de fourniture du ou des catalyseurs ainsi sélectionné(s).

Cette étape de fourniture peut, le cas échéant, englober une étape de fabrication dudit catalyseur.

La présente invention concerne également, selon un autre de ses aspects, un système informatique pouvant se caractériser en ce qu'il comporte des moyens pour :

- i) permettre de formuler au moins une requête concernant une transformation chimique transformant au moins un motif réactionnel d'au moins un composé,
- ii) identifier, dans une base de données renseignant sur la réactivité d'un ensemble de catalyseurs vis-à-vis de motifs réactionnels répertoriés dans la base de données, un motif réactionnel répertorié ayant un rapport avec le motif à transformer,
- iii) sélectionner en fonction du motif réactionnel répertorié ainsi identifié dans la base de données et de la transformation à effectuer au moins un catalyseur ayant la réactivité requise pour la transformation et éditer ce catalyseur.

Par « éditer », il faut comprendre afficher, imprimer, enregistrer dans un fichier, transmettre à distance ou livrer.

L'invention a encore pour objet un procédé pour sélectionner au moins un catalyseur utilisable pour une réaction donnée, caractérisé par le fait que le catalyseur est sélectionné en fonction du rendement de production des produits de réaction affectés à au moins une sonde de réactivité présente dans la base de données et transformée selon ladite réaction.

Les catalyseurs répertoriés dans la base de données peuvent être de nature chimique, organique ou inorganique, et notamment de nature organométallique, ou encore biologique à l'image des protéines, cellules ou enzymes.

En l'occurrence, il peut s'agir de tous les catalyseurs utilisables en synthèse catalytique homogène ou hétérogène.

Les catalyseurs de conversion chimique comprennent la plupart des éléments du tableau périodique et sont solides d'une manière générale dans les conditions usuelles de réaction.

A titre illustratif et non limitatif de ces catalyseurs, on peut notamment citer les 5 catalyseurs à base de bismuth, étain, nickel, palladium, antimoine, ruthénium, titane, zirconium, iridium, cuivre, cobalt, rhodium, platine et de terres rares.

Ces catalyseurs peuvent être testés isolément ou sous forme de combinaisons.

Ces catalyseurs peuvent également être sous une forme supportée. Le type de support peut être choisi parmi des argiles inertes, des zéolithes, des céramiques, du carbone 10 ou un matériau organique inerte. Il peut également s'agir d'oxydes métalliques à l'image de  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Ces supports peuvent être mis en œuvre sous des formes solides diverses comme par exemple nids d'abeilles, particules ou réseaux.

A titre illustratif et non limitatif des catalyseurs selon l'invention, on peut notamment citer les catalyseurs suivants :  $\text{Pd}/\text{Al}_2\text{O}_3$  ;  $\text{Pd}/\text{BaSO}_4$  ;  $\text{Pd}/\text{CaCO}_3$ ;  $\text{Pd}/\text{PEI}$  ; 15  $\text{Pd}/\text{CaCO}_3$ ,  $\text{Pd}/\text{C}$  ;  $\text{Pt}/\text{C}$  ;  $\text{Ru}/\text{C}$  ;  $\text{Re}/\text{C}$  ;  $\text{Rh}/\text{C}$  ;  $\text{Rh}/\text{Al}_2\text{O}_3$  ;  $\text{Ir}/\text{C}$  ;  $\text{Ir}/\text{CaCO}_3$ .

Les catalyseurs peuvent être ou non spécialisés vis-à-vis d'une réaction biologique ou chimique, par exemple une réaction d'hydrogénéation.

La réactivité des catalyseurs peut s'apprécier en terme de rendement et/ou de sélectivité. Toutefois, cette activité catalytique peut également se traduire par un défaut 20 d'activité pour la transformation chimique d'un motif réactionnel et être précisément intéressante à ce titre. De même, cette réactivité peut se traduire par la manifestation d'une sélectivité particulière au niveau de la réaction.

Généralement, un catalyseur est considéré actif, au sens de la présente invention, lorsqu'il permet de réaliser la réaction chimique considérée avec le rendement 25 suffisant.

La base de données peut renseigner sur la réactivité de l'ensemble des catalyseurs retenus, vis-à-vis des sondes de réactivité et des motifs réactionnels répertoriés, pour des conditions réactionnelles identiques ou différentes. Cela peut permettre 30 d'apprécier au mieux la spécificité des catalyseurs et d'optimiser ainsi la connaissance de leur performance en termes d'efficacité et surtout de sélectivité.

Les conditions réactionnelles peuvent être celles généralement utilisées pour la réaction chimique considérée. Elles imposent généralement le choix d'un milieu solvant,

de son degré de dilution, des co-réactifs, d'une température d'une pression et/ou du pH du milieu réactionnel.

On désigne par « co-réactif » tout composé qui de part sa présence dans le milieu réactionnel est susceptible de participer à la réaction comme le monoxyde de carbone par exemple, et /ou d'affecter le rendement et/ou la sélectivité de la réaction. Il peut notamment s'agir d'un composé acide, basique, d'un métal chélatant.

En l'occurrence, c'est en ajustant ces paramètres liés aux conditions réactionnelles, qu'il peut s'avérer possible de contrôler de manière plus précise la nature du produit final et/ou d'orienter la sélectivité de la réaction entre deux fonctions ou encore *via* la formation privilégiée d'une forme diastéréomérique du produit final.

L'invention pourra être mieux comprise à la lecture de la description détaillée qui va suivre, et à l'examen du dessin annexé, sur lequel :

- la figure 1 représente de manière schématique un système informatique permettant de mettre en œuvre l'invention,
- la figure 2 est un schéma en blocs illustrant différentes étapes d'un exemple de mise en œuvre du procédé selon l'invention,
- la figure 3 représente de manière schématique différentes entités d'une base de données conforme à l'invention,
- les figures 4 à 11 représentent des exemples d'entités de la base,
- les figures 12 à 14 représentent de manière schématique des exemples de chromatogrammes,
- la figure 15 représente un chromatogramme virtuel,
- la figure 16 est un exemple d'algorithme de génération d'un chromatogramme virtuel,
- la figure 17 représente un exemple de chromatogramme virtuel obtenu au cours de l'exécution de l'algorithme de la figure 16, et
- les figures 18 et 19 illustrent un exemple de sélection de milieux réactionnels suite à la formulation d'une requête.

Un procédé selon l'invention est avantageusement mis en œuvre au moyen d'un système informatique qui peut comporter, comme illustré sur la figure 1, un serveur informatique 1 relié par un réseau 2 à un terminal utilisateur 3. Le réseau 2 est par exemple un réseau Intranet ou Internet.

Le serveur informatique 1 peut en outre être relié à un système 4 d'acquisition de données, ce système pouvant comporter un bras manipulateur et un appareil d'analyse tel que par exemple un chromatographe à phase gazeuse ou liquide. Cet appareil d'analyse fournit des données sur chaque milieu réactionnel après réaction, comme cela sera précisé  
5 plus loin.

Le serveur informatique 1 comporte ou peut accéder à des moyens de stockage de données conventionnels et notamment peut être capable de communiquer avec d'autres ordinateurs, par le réseau 2 ou par d'autres réseaux.

Le terminal 3 est par exemple un ordinateur de type PC relié par une liaison  
10 téléphonique ou autre au réseau 2.

Conformément à un aspect de l'invention, le serveur 1 est agencé pour permettre dans une première étape 6, comme illustré à la figure 2, l'acquisition de données relatives à la transformation chimique à effectuer, pour interroger dans une deuxième étape 15 7 une base de données relationnelle 5, dont des entités 5a à 5g ont été représentées de manière simplifiée à la figure 3, et permettre l'édition, dans une troisième étape 8, d'au moins un catalyseur ayant une utilité pour effectuer la transformation.

La base de données relationnelle 5 peut stocker des informations par exemple sous forme de tables constituées de colonnes et de lignes.

On a représenté partiellement à la figure 4 l'entité 5a intitulée « Compound »  
20 dans laquelle sont enregistrées, pour chaque composé répertorié dans la base, et parmi lesquels figurent notamment les sondes de réactivité, motifs réactionnels, et les produits de réaction, un identifiant « ID », par exemple un numéro, le nom « name » du composé, la référence « MOL-ID » d'une table générée par un outil commercial tel que « Chem Draw » comprenant le dessin, le poids moléculaire, la formule brute, etc ..., et le cas échéant le  
25 nombre de liaisons « NbrPartComp » susceptibles d'être modifiées lors des réactions.

La base de données 5 comporte également une entité 5b intitulée « Tbl PartComp » qui contient des informations concernant le nom et l'état des liaisons de chaque groupe fonctionnel susceptible de réagir du composé répertorié dans l'entité 5a.

L'entité 5b contient une clé primaire « ID-PartComp », l'identifiant « ID-  
30 Compound » du composé auquel appartiennent les liaisons, le nom « Name » de chaque liaison, ce nom pouvant comporter par exemple le numéro de la liaison au sein du composé, et l'indice de réactivité « Level », 0 pouvant signifier qu'il n'y a pas de liaison

susceptible d'être transformée, la liaison étant par exemple C-H, 1 pouvant signifier par exemple que la liaison est de type C-X ou C=C, 2 pouvant signifier par exemple que la liaison est de type C≡C, etc ...

Dans l'exemple considéré, un grand nombre d'expériences est effectué pour 5 tester la réactivité des sondes de réactivité dans des milieux réactionnels prédéfinis, et ainsi renseigner la base de données 5 avec des informations utiles concernant les propriétés des catalyseurs répertoriés dans la base de données vis-à-vis des sondes de réactivité.

Ces expériences peuvent être effectuées par exemple selon une procédure normalisée au moyen de plaques, encore appelées « blocs », comportant chacune une 10 pluralité de puits, chaque plaque étant associée à une sonde de réactivité donnée, chaque puits comportant un milieu réactionnel différent, c'est-à-dire comportant par exemple outre la sonde de réactivité un catalyseur particulier, des co-réactifs particuliers le cas échéant, des solvants particuliers, etc ...

L'entité 5c, intitulée « Mixture », permet d'enregistrer dans la base 5 les 15 informations associées à un milieu réactionnel donné.

Dans cette entité 5c peuvent ainsi être enregistrés pour chaque milieu réactionnel, comme on le voit sur la figure 6, une clef primaire « ID », le ou les identifiants « ID-Reagent » du ou des composés du milieu dans lequel s'effectue la réaction, chaque identifiant étant par exemple un numéro, l'identifiant « ID-Catalyst » du catalyseur utilisé, 20 celui-ci étant par exemple un numéro également.

Les identifiants « ID-Reagent » et « ID-Catalyst » renvoient par exemple à des composés référencés dans la colonne « Name » dans les tables 5y « Reagent » et 5g « Catalyst », représentées partiellement aux figures 7 et 8.

La base de données 5 comporte en outre des entités « Chromato » 5d et 25 « Signal » 5e, dans lesquelles sont enregistrées des informations liées à l'analyse chromatographique des milieux réactionnels des plaques. Ces entités 5d et 5e ont été représentées partiellement aux figures 9 et 10.

Les constituants de chaque puits d'une plaque donnée sont analysés par chromatographie en phase liquide ou gazeuse et l'entité « Chromato » permet de conserver 30 les informations de chaque injection chromatographique qui correspond au résultat d'une réaction.

On a représenté sur les figures 12 à 14 trois exemples de chromatogrammes obtenus en faisant réagir la même sonde de réactivité dans trois milieux réactionnels différents, ce qui a permis de détecter la présence des composés C<sub>1</sub> à C<sub>4</sub>.

Dans l'entité 5d sont enregistrées par exemple, comme on peut le voir à 5 l'examen de la figure 9, un clef primaire « ID », la date d'injection « Date of Injection », l'identifiant « ID-Mixture » du milieu réactionnel, dont le détail est connu de l'entité 5c, l'identifiant « ID-Compound » de la sonde de réactivité, dont le nom et d'autres caractéristiques sont connues de l'entité 5a et le nom « Name of Chromato » de la méthode analytique utilisée, qui peut être un numéro.

10 L'entité 5e conserve les informations d'un signal chromatographique, c'est-à-dire d'un pic chromatographique.

Dans l'entité 5e sont enregistrées par exemple, comme on peut le voir à 15 l'examen de la figure 10, une clef primaire « ID Signal », l'identifiant « ID-Chromato » du chromatogramme auquel appartient le pic, l'identifiant « ID-Compound » de chaque composé correspondant à un signal, le temps de rétention « Retention Time », exprimé par exemple en minutes et centièmes de minutes, le rendement « Yield » exprimé par exemple en pourcentage et l'aire « area » du pic.

Les entités 5d et 5e peuvent être chargées automatiquement à partir d'au moins un fichier de résultat généré automatiquement par le chromatographe.

20 Un tel fichier peut par exemple se présenter sous la forme du tableau « Résultat » représenté partiellement à la figure 11.

Ce tableau comporte une colonne « numéro » qui comporte le numéro des lignes du tableau, et sept champs dans lesquels sont enregistrés respectivement, pour le champ 1, le nom des réactifs, pour le champ 2 le numéro d'ordre du signal dans le chromatogramme, pour le champ 3 le temps de rétention, pour le champ 4 l'aire du signal, pour le champ 5 le catalyseur et le nom de l'analyse, pour le champ 6 le numéro de l'analyse et pour le champ 7 le rendement.

Pour calculer le rendement, on commence par calculer la somme S des aires figurant dans la colonne du champ 4 et correspondant à une même analyse, c'est-à-dire 30 ayant même numéro d'analyse dans le champ 6.

Ensuite, pour une ligne donnée, la valeur portée dans la colonne du champ 7 est égale à 100 fois celle portée dans la colonne du champ 4, divisée par S.

Aucun calcul de rendement n'est effectué lorsque les valeurs figurant dans la colonne du champ 3 sont nulles.

L'entité 5d peut être chargée automatiquement à partir du fichier « Résultat ». L'identifiant « ID » est incrémenté automatiquement à chaque nouvelle analyse enregistrée dans la base, la colonne « Name of Chromato » peut être remplie par les données figurant dans le champ 5 du tableau « Résultat », la colonne « Date of injection » peut être prise égale à la date du jour et le numéro porté dans la colonne « ID-Mixture » est obtenu par traitement des champs 1 et 5. Les colonnes « Programme » et « ID-Compound » de l'entité 5d peuvent être remplies lors de la préparation des plaques.

10 L'entité 5e peut également être remplie de manière automatique, l'identifiant « ID-Signal » étant par exemple un numéro incrémenté automatiquement à chaque nouvelle analyse enregistrée dans la base, l'identifiant « ID-Chromato » est pris égal au numéro « ID » de la dernière analyse traitée, la colonne « Retention Time » est remplie à partir des données figurant dans le champ 3 du tableau « Résultat », de même pour la 15 colonne « Area » qui correspond au champ 4 du tableau résultat et la colonne rendement « Yield » au champ 7 du tableau « Résultat ».

Concernant le remplissage de la colonne « ID-Compound » de l'entité 5e, c'est-à-dire l'attribution à chaque signal du chromatogramme d'un composé chimique, on peut procéder de la manière suivante.

20 Tous les signaux obtenus avec la même méthode analytique, c'est-à-dire ayant le même numéro dans la colonne « Programme » de l'entité 5d et la même sonde de réactivité, c'est-à-dire le même numéro dans la colonne « ID-Compound » de l'entité 5d, peuvent être affectés à un chromatogramme virtuel qui aurait été obtenu par une expérience fictive donnant en une fois tous les produits de transformation d'une sonde de 25 réactivité donnée.

Une fois que sont associés à tous les signaux de ce chromatogramme virtuel des composés déterminés, on peut attribuer à tout signal comparable obtenu avec la même méthode analytique le composé correspondant. Cela peut permettre d'affecter à chaque signal, un composé, de façon automatique sur un grand nombre de signaux et de faciliter 30 l'analyse du résultat de la réaction pour un nouveau catalyseur ou des conditions opératoires différentes, puisqu'il n'y a pas à procéder à l'analyse chimique des composés dont les temps de rétention coïncident sensiblement avec ceux des composés déjà analysés.

Un exemple très schématique de chromatogramme virtuel, construit à partir des signaux des chromatogrammes des figures 12 à 15, a été représenté à la figure 16.

On va maintenant décrire un exemple de procédé permettant de générer un tel chromatogramme virtuel.

5 Tout d'abord, une première liste A est générée à partir des données des entités 5d et 5e avec toutes les lignes qui concernent la même sonde de réactivité, c'est-à-dire qui ont le même identifiant « ID-Compound » dans l'entité 5d et la même méthode analytique, c'est-à-dire le même numéro de « Programme ».

Cette liste est triée dans le sens décroissant du nombre de signaux présents  
10 dans chaque analyse, c'est-à-dire ayant le même numéro dans la colonne « ID-Chromato ». Les pics représentant moins de 5 % de la surface totale des pics d'une analyse sont considérés comme non significatifs et on ne cherche pas à leur attribuer un composé.

Ensuite, une deuxième liste B est générée avec tous les signaux de la première analyse de la liste A, c'est-à-dire celle comprenant le plus grand nombre de pics. Cette  
15 deuxième liste B est triée dans le sens croissant des temps de rétention.

Ensuite, une troisième liste C de tous les signaux présents dans toutes les analyses de la liste A est établie et le chromatogramme virtuel est généré en complétant la liste B selon l'algorithme de la figure 16.

Cet algorithme est mis en œuvre avec une valeur donnée pour la durée  
20 minimale  $T_m$  tolérée entre deux signaux pour les considérer comme distincts. Une valeur faible de  $T_m$  entraîne un chromatogramme avec beaucoup de signaux tandis qu'une valeur élevée génère un chromatogramme possédant peu de signaux.  $T_m$  est par exemple égal à 0,2 mn.

A l'étape 50, les signaux de la liste C sont lus de manière séquentielle et une  
25 variable de temps de rétention  $T_1$  est initialisée à 0.

Pour chaque signal W de la liste C ainsi lu, de temps de rétention  $T_c$ , il y a à l'étape 51 lecture séquentielle des signaux de la liste B, à chaque signal X de cette liste étant associé un temps de rétention  $T_b$ .

A l'étape 52, on détermine si le temps de rétention  $T_c$  du signal W de la liste C  
30 en cours de lecture est plus grand que  $T_1$  et plus petit que le temps de rétention  $T_b$  du signal X de la liste B en cours de lecture moins  $T_m$ .

Dans la négative, on passe à l'étape 53 au cours de laquelle on attribue la valeur  $T_b + T_m$  à la variable  $T_1$  et on lit le signal X suivant de la liste B, de temps de rétention correspondant  $T_b$ . Ensuite, à l'étape 54, si la liste B n'est pas finie, on retourne à l'étape 52.

5 Si à l'étape 52 le temps de rétention  $T_c$  est supérieur à  $T_1$  et que le temps de rétention  $T_c$  est inférieur à  $T_b - T_m$ , ce qui correspond par exemple à la situation de la figure 17, on passe à l'étape 55 au cours de laquelle on vérifie que la liste B n'est pas finie ou que  $T_c$  est supérieur à  $T_1$ .

10 Dans l'affirmative, à l'étape 56, on ajoute le pic W à la liste B et l'on trie à nouveau cette dernière.

Ensuite, à l'étape 57, on passe à la lecture du signal suivant W de la liste C, de temps de rétention correspondant  $T_c$  et  $T_1$  est initialisé à zéro. A l'étape suivante 58, on vérifie que la liste C n'est pas finie et si tel est le cas, on retourne à l'étape 51.

Si le test est négatif à l'étape 55, on passe directement à l'étape 57.

15 Une fois le chromatogramme virtuel généré, une plage de temps de rétention peut être attribuée à chaque composé, en prenant par exemple comme borne inférieure de chaque plage la moitié de la somme des temps de rétention du pic concerné et de celui qui le précède de la liste B générée précédemment.

20 A chaque pic d'un chromatogramme peut être associé, comme on peut le voir sur la figure 12, une plage 60 de temps provisoire qui, dans le cas de la figure 12, est centrée sur le sommet du pic concerné et dont l'étendue temporelle de part et d'autre du sommet du pic correspond à la durée minimale  $T_m$  tolérée entre deux signaux. Lorsque deux pics sont séparés d'au moins cette durée minimale  $T_m$  mais de moins du double de cette durée minimale, les plages 60 provisoires affectées aux composés correspondants à ces pics présentent une frontière 61 correspondant au milieu de l'intervalle entre les temps de rétention correspondants aux sommets des pics, comme on peut le voir sur la figure 13.

25 La base de données 5 peut être interrogée de manière à répondre à des requêtes portant sur les motifs réactionnels répertoriés.

On a représenté à la figure 18 un extrait d'un champs de données provenant de 30 la base de données 5, dont chaque ligne comporte des informations concernant le rendement de transformation de deux motifs réactionnels dont les noms sont portés dans les colonnes intitulées « Fct Groupe 1<sup>er</sup> » et « Fct Groupe 2d » en présence d'un milieu

réactionnel dont l'identifiant est porté dans la colonne intitulée « Medium ». De part et d'autre du nom du motif réactionnel sont portés l'état des liaisons. Le même numéro à gauche et à droite du nom du motif réactionnel signifie que celui-ci ne s'est pas transformé. La diminution d'une unité signifie par exemple qu'il y a eu une réduction. Le chiffre 2 5 indique par exemple que le motif réactionnel est encore susceptible de subir une réduction. Le chiffre 0 indique par exemple qu'il y a eu rupture de liaison et donc que le motif réactionnel n'est plus susceptible de subir une nouvelle étape de réduction. Le chiffre 1 indique que le composé est susceptible d'être transformé et notamment réduit en fonction de la nature de la liaison. Dans l'exemple de la première ligne de la table de la figure 18, il 10 faut comprendre que le motif réactionnel « Arylcetone » n'a pas réagi et que le motif réactionnel « 1-Alkylalcene » n'a que très faiblement réagi, puisque ce motif réactionnel 15 est demeuré inchangé avec une rendement de 99,4 %.

Dans l'exemple de la troisième ligne du tableau, le motif réactionnel « Aryliodium » a subi une réduction avec un rendement de 5,28 %, l'iode ayant été 15 remplacé par de l'hydrogène.

Une requête concernant deux motifs réactionnels présents au sein d'un même milieu réactionnel peut être formulée, en indiquant pour chaque motif réactionnel si l'on souhaite que celui-ci réagisse ou non.

La requête peut par exemple être formulée de manière à chercher les milieux 20 réactionnels qui permettent la réduction d'un motif réactionnel « Arylbromure » sans réduire un motif réactionnel « Arylcétone ».

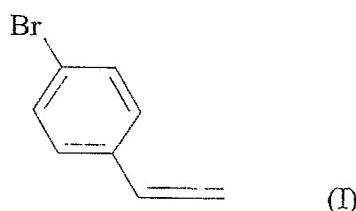
On a représenté à la figure 19 deux lignes de résultat correspondant à cette requête. On voit que les milieux réactionnels 356 et 391 permettent la réduction du motif « Arylbromure », puisque l'indice de réactivité est passé de 1 à 0, tout en laissant inchangé 25 le motif réactionnel « Arylcétone », en totalité pour le milieu réactionnel 356 et avec un rendement de 96,36 % pour le milieu réactionnel 391. La connaissance du milieu réactionnel permet de remonter au catalyseur présent dans celui-ci.

En revenant à la figure 2, l'acquisition de données à l'étape 6 peut se faire par exemple par le terminal 3 après connexion au serveur 1 et identification le cas échéant de 30 l'utilisateur par un code d'accès. L'utilisateur peut être lui-même un système informatique programmé pour rechercher des informations pertinentes sur un réseau informatique.

La réaction à accomplir peut être entrée sur un clavier ou au moyen d'une souris, par exemple sur le terminal 3, ou sous la forme d'un fichier image ou autre, et les données rentrées peuvent notamment comporter le ou les composés de départ, et le ou les composés souhaités à l'arrivée.

- 5 L'étape suivante 7 peut comporter la décomposition des composés intervenants dans la réaction en motifs réactionnels et l'identification des motifs réactionnels qui subissent une transformation et, le cas échéant, ceux qui sont préservés. Cette décomposition peut être effectuée de manière automatique par un système informatique et notamment le serveur 1, de manière à permettre la formulation interne au système 10 informatique 6 d'une requête contenant l'identité des motifs réactionnels concernés et pour chacun d'eux, la variation de l'indice de réactivité, afin d'obtenir de la base de données le ou les noms des catalyseurs appropriés.

Par exemple, dans le cas où la réaction est une hydrogénéation d'un composé de formule I comme suit :

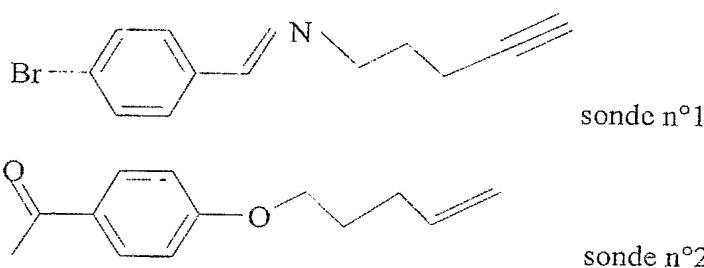


15

le système informatique peut permettre d'identifier deux motifs réactionnels, à savoir une liaison éthylénique et une liaison carbone – brome.

Des motifs réactionnels ayant un rapport avec ceux-ci, présents sur des sondes de réactivité, sont répertoriés dans la base de données 5.

- 20 Par exemple, la sonde n° 1 ci-dessous comporte le motif réactionnel liaison carbone – brome et la sonde n°2 le motif réactionnel liaison éthylénique.



La base de données 5 contient des informations sur la réactivité des catalyseurs répertoriés, notamment le rendement de transformation, pour chacun des motifs réactionnels de la sonde considérée.

Par exemple, la réactivité de plusieurs catalyseurs vis-à-vis de la transformation des motifs réactionnels a été testée pour chacune des deux sondes, étant rapportée ci-après en tableau I pour la sonde n°1 et en tableau II pour la sonde n°2. On peut voir que les catalyseurs Pd/C, Pt/C, Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Pd/BaSO<sub>4</sub>, Pd/CaCO<sub>3</sub>, Pd/CaCO<sub>3</sub>.Pb et Ir/CaCO<sub>3</sub> sont efficaces pour réduire le motif liaison éthylénique et les mêmes catalyseurs Pd/C, Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Pd/BaSO<sub>4</sub> pour la réduction de la liaison carbone – brome du motif bromure.

**Tableau I (sonde n° 1)**

Catalyseur	Réduction liaison carbone - brome
Er <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-
Pt/C	-
Pt/C, AcOH	-
Pd/C	100 %
Pd/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	100 %
Pd/BaSO <sub>4</sub>	100 %
Pd/CaCO <sub>3</sub>	-
Pd/CaCO <sub>3</sub> .Pb	-
Pd/Poly	-
Ni/SiO <sub>2</sub> .Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-
Ru/C	-
Re/C	-
Rh/C	-
Rh/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-
Ir/C	-
Ir/CaCO <sub>3</sub>	-

**Tableau II (sonde n° 2)**

Catalyseur	Réduction liaison éthylénique
Er <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1 %
Pt/C	97 %
Pd/C	99 %
Pd/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	100 %
Pd/BaSO <sub>4</sub>	96 %
Pd/CaCO <sub>3</sub>	96 %
Pd/CaCO <sub>3</sub> .Pb	100 %
Pd/Poly	1 %
Ni/SiO <sub>2</sub> .Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1 %
Ru/C	15 %
Re/C	1 %
Rh/C	70 %
Rh/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	23 %
Ir/C	8 %
Ir/CaCO <sub>3</sub>	95 %

Le tableau III ci-après rend compte d'une étroite corrélation entre les données de réactivités prédictives acquises à l'aide des sondes de réactivité et les réactivités vérifiées expérimentalement en réalisant l'hydrogénéation du composé de formule I avec les sept catalyseurs identifiés précédemment.

5

Tableau III

Catalyseur	Sonde 1 Réduction liaison carbone - brome	Sonde 2 Réduction liaison éthylénique	Composé I Réduction liaison carbone - brome	Composé I Réduction liaison éthylénique
Pd/C	1 %	1 %	1 %	1 %
Pd/BaSO <sub>4</sub>	1 %	1 %	70 %	1 %
Pd/Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1 %	1 %	1 %	1 %
Pt/C	0	1 %	0	1 %
Pd/CaCO <sub>3</sub>	0	1 %	30 %	1 %
Pd/CaCO <sub>3</sub> .Pb	0	1	0	40 %
Ir/CaCO <sub>3</sub>	0	1 %	0	100 %

Note : 1 = 100 % du rendement

0 = < 5 % du rendement

Le système informatique 1 permet de connaître le ou les catalyseurs capables d'effectuer les transformations recherchées pour les motifs réactionnels identifiés.

10

Dans le cas où plusieurs catalyseurs conviennent, un seul catalyseur efficace peut être édité en fonction par exemple de critères tels que la disponibilité commerciale de ce catalyseur ou le coût du catalyseur.

15

Par exemple, si les catalyseurs Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> et Pd/C conviennent et que seul le catalyseur Pd/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> est disponible auprès d'une entreprise interrogée par le système informatique, alors seul ce catalyseur est édité en réponse à la requête formulée par un utilisateur. Le catalyseur peut, le cas échéant, être adressé matériellement à l'utilisateur, voire être fabriqué à la demande. Le cas échéant, le catalyseur peut être adressé avec un conditionnement particulier facilitant la réalisation de tests.

20

Le système informatique peut éditer, outre la structure du catalyseur, son nom, son coût, son efficacité, et ses spécificités en termes de sélectivité.

Dans l'exemple qui vient d'être donné, les réponses aux requêtes formulées par l'utilisateur sont fournies par le serveur 1, mais on ne sort pas du cadre de la présente invention lorsque le système informatique est réduit à un seul ordinateur sur lequel tourne une application. Dans ce cas, l'application peut par exemple être téléchargée sur un site 5 distant ou présente sur un support informatique tel que par exemple un disque optique et être chargée sur l'ordinateur.

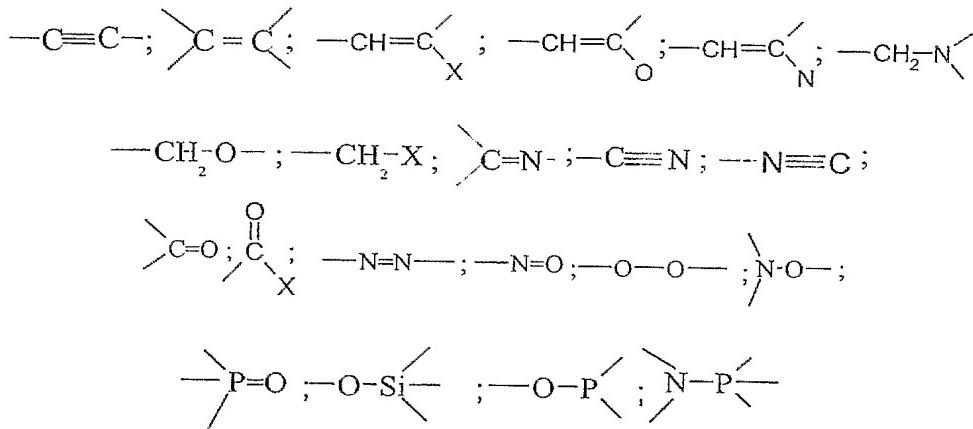
Dans toute la description, y compris les revendications, l'expression « comportant un » doit être comprise comme étant synonyme de « comportant au moins un », sauf si le contraire est spécifié.

REVENDICATIONS

1. Procédé pour délivrer au moins une information relative à la réactivité  
 5 d'un catalyseur vis-à-vis d'une transformation chimique d'au moins un motif réactionnel, caractérisé en ce qu'il comprend au moins les étapes consistant à :

- a) acquérir des données relatives à ladite transformation et, le cas échéant, à l'environnement structurel du motif réactionnel à transformer,
- b) identifier dans une base de données renseignant sur la réactivité d'un ensemble de catalyseurs vis-à-vis de motifs réactionnels répertoriés dans la base de données et présents sur des sondes de réactivité, au moins un motif réactionnel répertorié apparenté au motif à transformer,
- c) sélectionner dans la base de données en fonction d'une part du motif réactionnel répertorié ainsi identifié et d'autre part de la transformation à effectuer au moins un catalyseur ayant la réactivité requise pour la transformation.

2. Procédé selon la revendication 1, caractérisé en ce que le motif réactionnel est choisi parmi :



20

avec X représentant un atome d'halogène.

3. Procédé selon la revendication 2, caractérisé en ce que la base de données, contient pour chaque catalyseur répertorié des informations concernant le milieu réactionnel dans lequel il a été testé pour son activité catalytique.

4. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que pour au moins une partie des motifs réactionnels répertoriés dans la

REVENDICATIONS

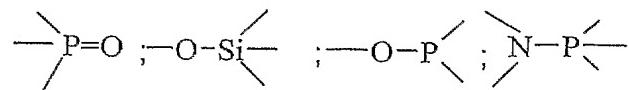
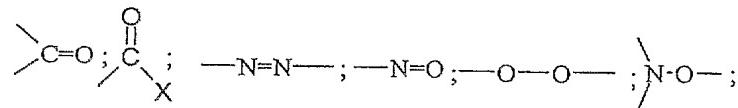
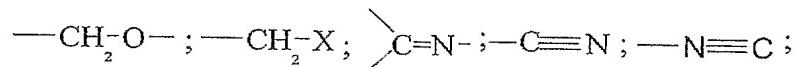
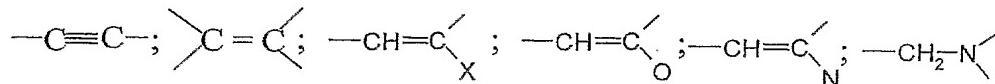
1. Procédé de sélection d'au moins un catalyseur utile pour la transformation chimique d'au moins un motif réactionnel, caractérisé en ce qu'il comprend au moins les étapes consistant à :

5 a) acquérir des données relatives à ladite transformation et, le cas échéant, à l'environnement structurel du motif réactionnel à transformer,

10 b) identifier dans une base de données renseignant sur la réactivité d'un ensemble de catalyseurs vis-à-vis de motifs réactionnels répertoriés dans la base de données et présents sur des sondes de réactivité, au moins un motif réactionnel répertorié apparenté au motif à transformer,

15 c) sélectionner dans la base de données en fonction d'une part du motif réactionnel répertorié ainsi identifié et d'autre part de la transformation à effectuer au moins un catalyseur ayant la réactivité requise pour la transformation.

2. Procédé selon la revendication 1, caractérisé en ce que le motif réactionnel est choisi parmi :



avec X représentant un atome d'halogène.

3. Procédé selon la revendication 2, caractérisé en ce que la base de données, contient pour chaque catalyseur répertorié des informations concernant le milieu réactionnel dans lequel il a été testé pour son activité catalytique.

4. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que pour au moins une partie des motifs réactionnels répertoriés dans la

base de données, sont associées à chaque motif répertorié des informations, visant à qualifier l'état des liaisons qui lui sont associées.

5. Procédé selon la revendication précédente, caractérisé en ce que l'état des liaisons est un chiffre entier variant de 0 à 3.

6. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la base de données contient des informations qui renseignent sur l'influence de l'environnement structurel d'un motif réactionnel répertorié.

7. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la transformation a lieu lors d'une réaction chimique choisie parmi les réactions d'halogénéation, de réduction, d'hydrogénéation, d'oxydation, d'hydrolyse, de déshydratation, d'estérification, réactions catalytiques acides ou basiques, réactions multicomposants métallocatalysées, réactions de trimérisation, et réactions de formation d'hétérocycle.

8. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la transformation est choisie parmi les : réduction d'imine en amine, coupure d'une liaison C-N ou C-O benzylique, réduction d'un halogénure, réduction d'une fonction nitro en amine, nitrile en amine, réduction d'amide, réduction d'un motif alcynique, réduction d'une cétone en alcool, réduction d'une cétone en alcane et coupure d'un motif éther.

9. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que l'acquisition des données à l'étape a) comporte la formulation d'une requête mentionnant le motif réactionnel concerné et la nature de la transformation que l'on souhaite lui faire subir.

10. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la transformation est formulée en indiquant la variation de l'état des liaisons des groupements fonctionnels à transformer ou à conserver au niveau de chaque motif réactionnel issu de la transformation ou la différence de l'état des liaisons dans le motif réactionnel considéré entre les états avant et après transformation.

11. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que l'acquisition de données comporte la formulation d'une requête concernant la transformation et/ou la non transformation d'au moins deux motifs réactionnels différents.

base de données, sont associées à chaque motif répertorié des informations, visant à qualifier l'état des liaisons qui lui sont associées.

5. Procédé selon la revendication précédente, caractérisé en ce que l'état des liaisons est un chiffre entier variant de 0 à 3.

6. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la base de données contient des informations qui renseignent sur l'influence de l'environnement structurel d'un motif réactionnel répertorié.

10. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la transformation a lieu lors d'une réaction chimique choisie parmi les réactions d'halogénéation, de réduction, d'hydrogénéation, d'oxydation, d'hydrolyse, de déshydratation, d'estérification, réactions catalytiques acides ou basiques, réactions multicomposants métallocatalysées, réactions de trimérisation, et réactions de formation d'hétérocycle.

15. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la transformation est choisie parmi les : réduction d'imine en amine, coupure d'une liaison C-N ou C-O benzylique, réduction d'un halogénure, réduction d'une fonction nitro en amine, nitrile en amine, réduction d'amide, réduction d'un motif alcynique, réduction d'une cétone en alcool, réduction d'une cétone en alcane et coupure d'un motif éther.

20. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que l'acquisition des données à l'étape a) comporte la formulation d'une requête mentionnant le motif réactionnel concerné et la nature de la transformation que l'on souhaite lui faire subir.

25. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la transformation est formulée en indiquant la variation de l'état des liaisons des groupements fonctionnels à transformer ou à conserver au niveau de chaque motif réactionnel issu de la transformation ou la différence de l'état des liaisons dans le motif réactionnel considéré entre les états avant et après transformation.

30. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que l'acquisition de données comporte la formulation d'une requête concernant la transformation et/ou la non transformation d'au moins deux motifs réactionnels différents.

12. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que dans le cas d'un premier motif réactionnel à transformer et d'un second motif réactionnel à ne pas transformer, ces premiers et second motifs réactionnels étant présents sur un composé de départ, la requête vise à sélectionner un catalyseur capable d'effectuer la transformation du premier motif avec un rendement suffisant tout en laissant le deuxième intact, ou à tout le moins en le transformant suffisamment peu.

5 13. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que l'acquisition de données à l'étape a) s'effectue en formulant une requête de transformation d'au moins un composé de départ, le procédé comportant l'analyse des composés de départ et d'arrivée en vue d'identifier le ou les motifs réactionnels réagissant et celui ou ceux ne réagissant pas.

10 14. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce qu'il comporte :

- 15 - la décomposition d'un composé de départ intervenant dans une réaction en différentes sous-structures,
- l'identification du ou des motifs réactionnels à transformer et, le cas échéant,
- l'identification du ou des motifs réactionnels devant être préservé(s).

20 15. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la base de données contient des données qui renseignent sur l'activité d'une partie au moins des catalyseurs répertoriés en fonction de différentes conditions réactionnelles, notamment la température du milieu réactionnel, l'acidité, la pression, la présence de solvants ou la méthode d'analyse.

25 16. Procédé de fourniture d'au moins un catalyseur utilisable pour transformer au moins un motif réactionnel d'au moins un composé selon une réaction chimique donnée, caractérisé en ce qu'il comprend outre les étapes a), b) et c) définies à la revendication 1 au moins une étape de fourniture du ou des catalyseurs ainsi sélectionné(s), et notamment la fabrication dudit catalyseur.

30 17. Système informatique (1) caractérisé en ce qu'il comporte des moyens pour :

- i) permettre de formuler au moins une requête concernant une transformation chimique transformant au moins un motif réactionnel d'au moins un composé,

12. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que dans le cas d'un premier motif réactionnel à transformer et d'un second motif réactionnel à ne pas transformer, ces premiers et second motifs réactionnels étant présents sur un composé de départ, la requête vise à sélectionner un catalyseur 5 capable d'effectuer la transformation du premier motif avec un rendement suffisant tout en laissant le deuxième intact, ou à tout le moins en le transformant suffisamment peu.

13. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que l'acquisition de données à l'étape a) s'effectue en formulant une requête de transformation d'au moins un composé de départ, le procédé comportant 10 l'analyse des composés de départ et d'arrivée en vue d'identifier le ou les motifs réactionnels réagissant et celui ou ceux ne réagissant pas.

14. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce qu'il comporte :

- la décomposition d'un composé de départ intervenant dans une réaction en 15 différentes sous-structures,
- l'identification du ou des motifs réactionnels à transformer et, le cas échéant,
- l'identification du ou des motifs réactionnels devant être préservé(s).

15. Procédé selon l'une quelconque des revendications précédentes, caractérisé en ce que la base de données contient des données qui renseignent sur l'activité 20 d'une partie au moins des catalyseurs répertoriés en fonction de différentes conditions réactionnelles, notamment la température du milieu réactionnel, l'acidité, la pression, la présence de solvants ou la méthode d'analyse.

16. Procédé de fourniture d'au moins un catalyseur utilisable pour transformer 25 au moins un motif réactionnel d'au moins un composé selon une réaction chimique donnée, caractérisé en ce qu'il comprend outre les étapes a), b) et c) définies à la revendication 1 au moins une étape de fourniture du ou des catalyseurs ainsi sélectionné(s), et notamment la fabrication dudit catalyseur.

- ii) identifier, dans une base de données renseignant sur la réactivité d'un ensemble de catalyseurs vis-à-vis de motifs réactionnels répertoriés dans la base de données, un motif réactionnel répertorié ayant un rapport avec le motif à transformer,
  - iii) sélectionner en fonction du motif réactionnel répertorié ainsi identifié dans la base de données et de la transformation à effectuer au moins un catalyseur ayant la réactivité requise pour la transformation et éditer ce catalyseur.
- 5

1 / 8

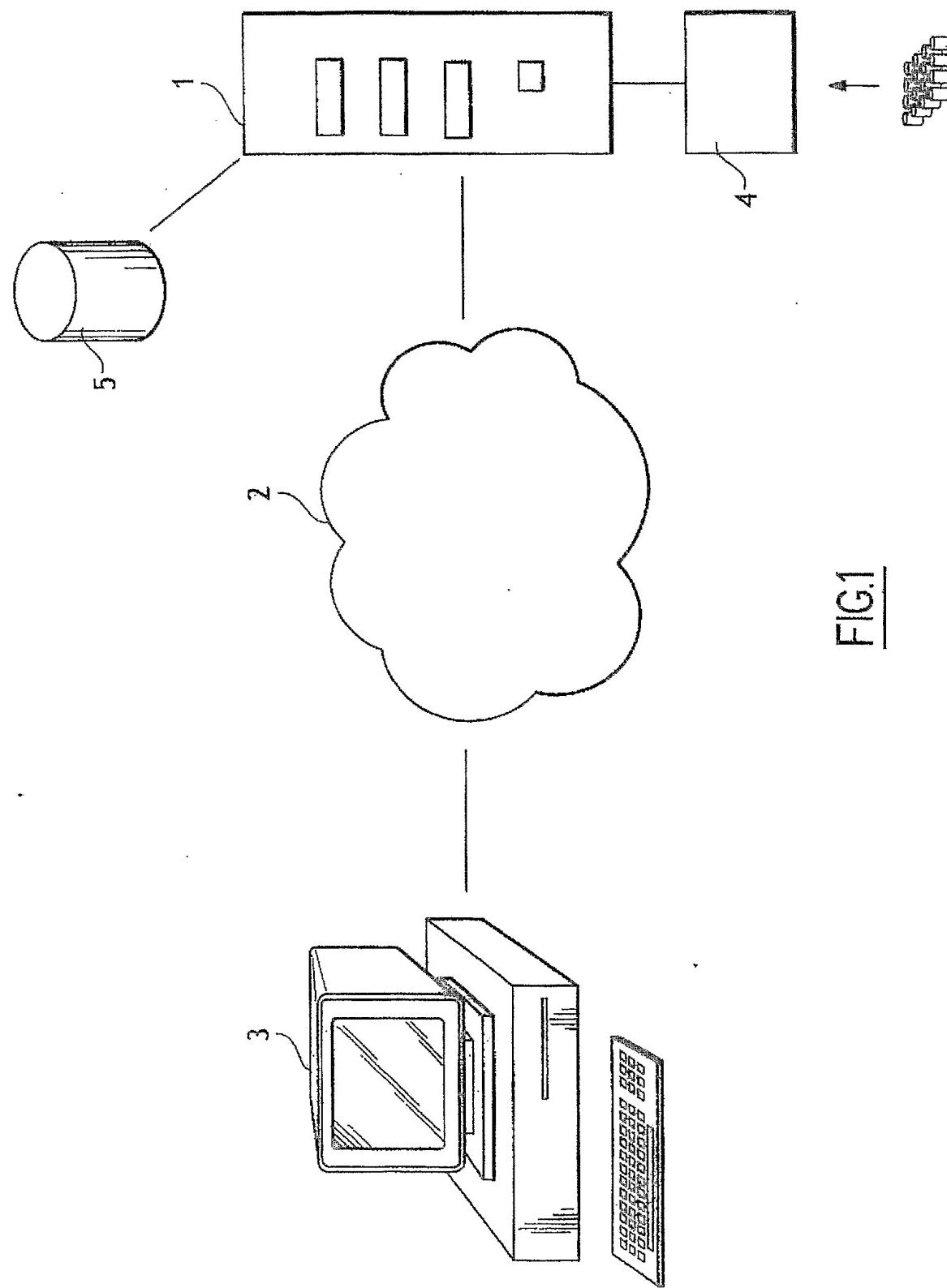
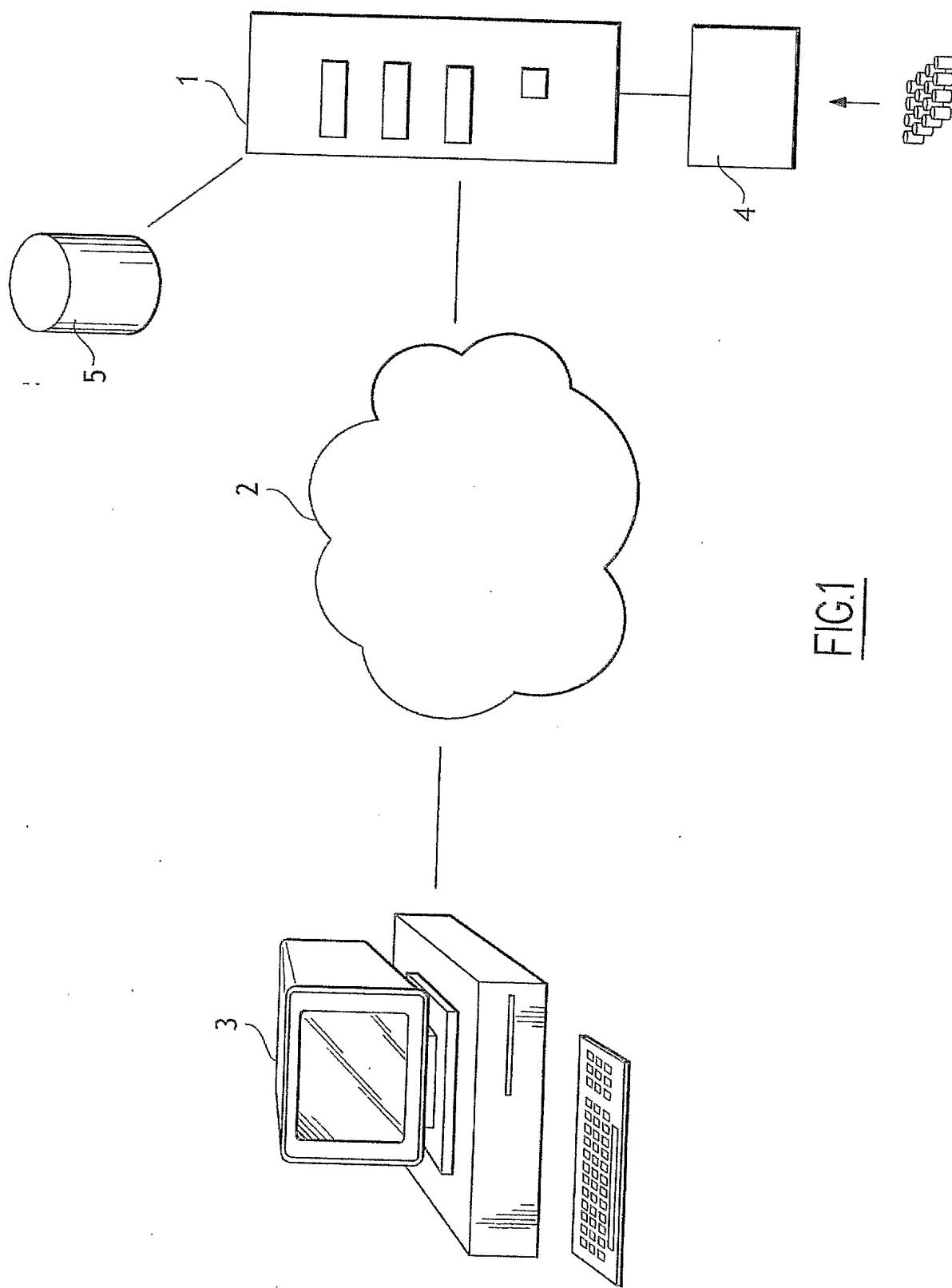
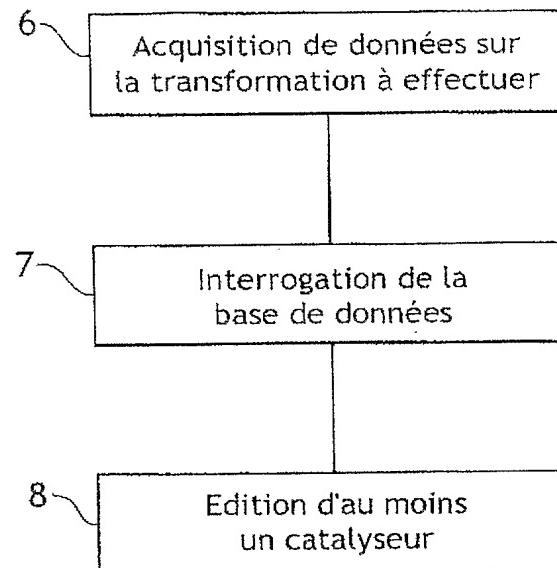
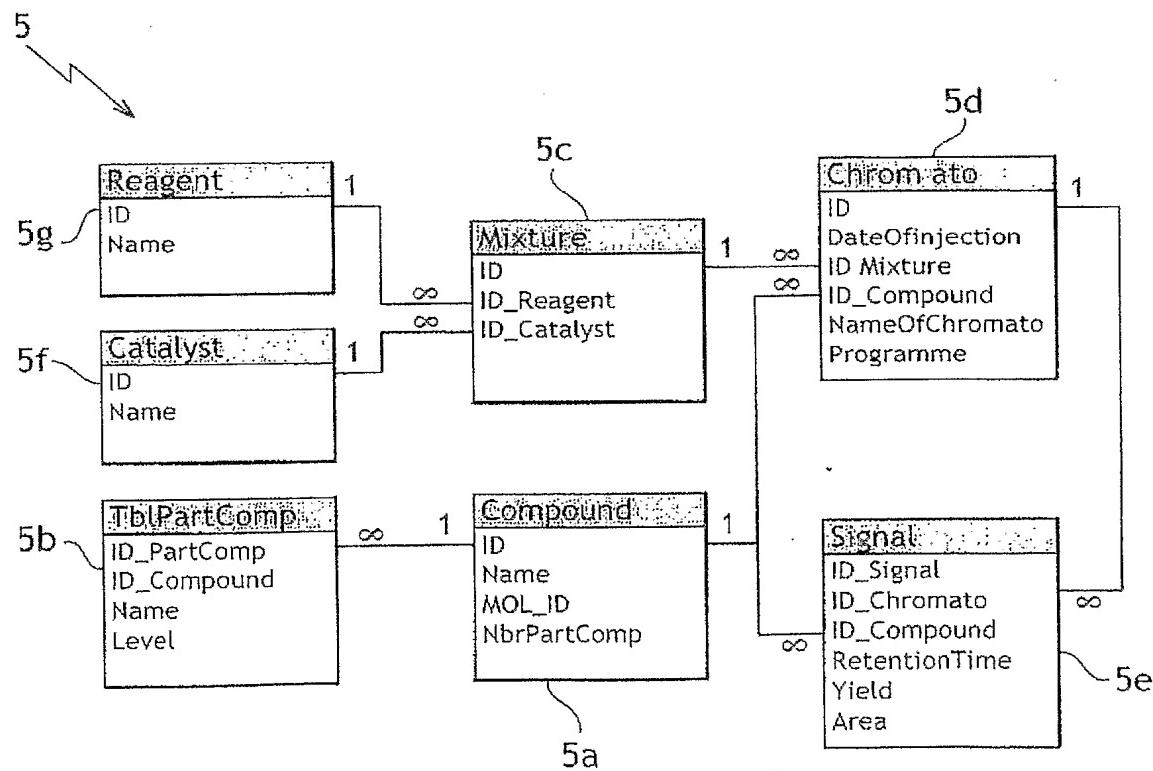


FIG1

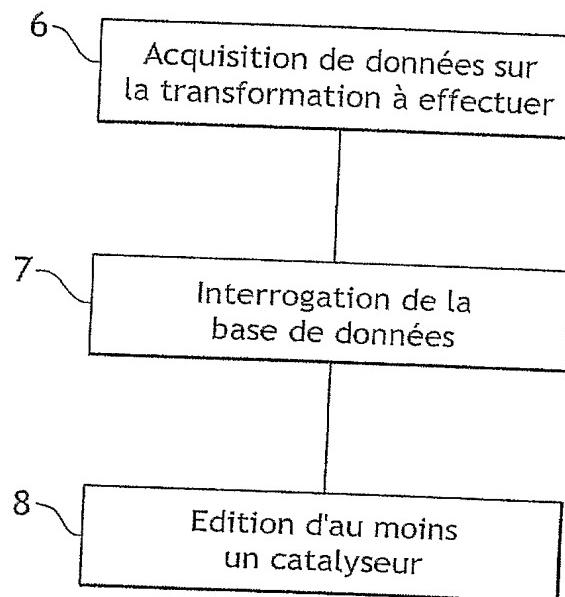
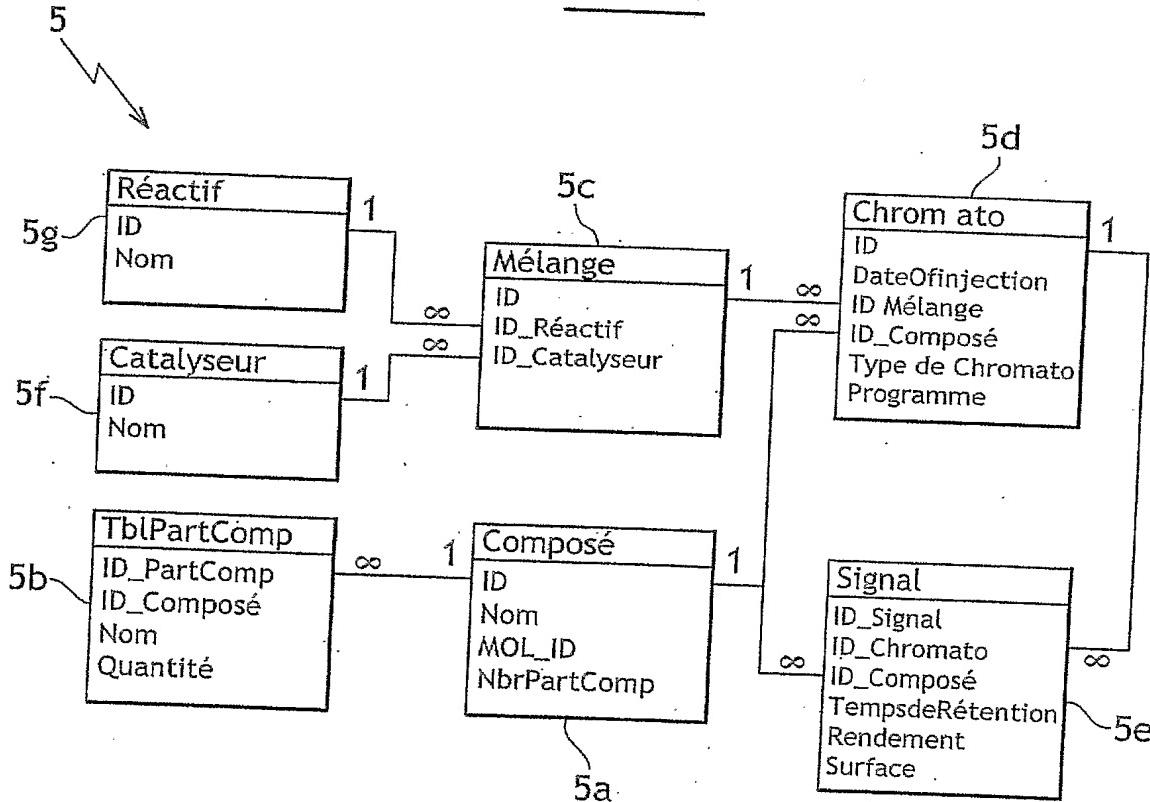
1 / 8



2 / 8

FIG.2FIG.3

2 / 8

FIG.2FIG.3

3/8

5a

Compound			
ID	NAME	MOLE_ID	NbrPartComp
1	Bromo-aryl-imino-nitrile Rep1	1	2
2	Keto-aryl-ether-alcen Rep2	2	2
3	Iodo-aryl-ether-alcen Rep3	3	2
4	Ester-hetero-iminium Rep4	4	1
5	Bromo-aryl-amino-nitrile Rep1	5	2
6	Aryl-amino-nitrile Rep1	6	2
7	alky-aryl-ether-alcen Rep2	7	2

FIG.4

5b

TblPartComp			
ID_Partcomp	ID-Compound	Name	Level
32	6	R1-Arylimin	1
33	7	R2-Arylketone	0
34	7	R2-1-Alkylalcen	2
35	8	R2-Arylketone	2
36	8	R2-1-Alkylalcen	1

FIG.5

5c

Mixture		
ID	ID_Reagent	ID_Catalyst
403	102	843
410	796	258
412	102	859

FIG.6

5g

Reagent	
ID	Name
102	EtOH
796	EtOH/AcOH
854	EtOH 50%H2O
861	EtOH 5Et3N
864	EtOH 5%Et3N

FIG.7

5f

Catalyst	
ID	Name
195	Rh/C
200	Pd/C
202	Rien/H2
204	Pd/Al2O3
205	Pd/BaSO4
207	Ru/C
209	Re/C
217	Ni/SiO2
220	Ir/C

FIG.8

3 / 8

5a

Composé			
ID	Nom	MOLE_ID	NbrPartComp
1	Bromo-aryl-imino-nitrile Rep1	1	2
2	Keto-aryl-ether-alcen Rep2	2	2
3	Iodo-aryl-ether-alcen Rep3	3	2
4	Ester-hetero-iminlum Rep4	4	1
5	Bromo-aryl-amino-nitrile Rep1	5	2
6	Aryl-amino-nitrile Rep1	6	2
7	alky-aryl-ether-alcen Rep2	7	2

FIG.4

5b

TblPartComp			
ID_Partcomp	ID_Composé	Nom	Quantité
32	6	R1-Arylimin	1
33	7	R2-Arylketone	0
34	7	R2-1-Alkylalcen	2
35	8	R2-Arylketone	2
36	8	R2-1-Alkylalcen	1

FIG.5

5c

Mélange		
ID	ID_Réactif	ID_Catalyseur
403	102	843
410	796	258
412	102	859

5g

FIG.6

5h

Réactif	
ID	Nom
102	EtOH
796	EtOH/AcOH
854	EtOH 50%H2O
861	EtOH 5Et3N
864	EtOH 5%Et3N

FIG.7

5i

Catalyseur	
ID	Nom
195	Rh/C
200	Pd/C
202	Rien/H2
204	Pd/Al2O3
205	Pd/BaSO4
207	Ru/C
209	Re/C
217	Ni/SiO2
220	Ir/C

FIG.8

4/8

5d

Chromato					
ID	Date of Injection	ID_Mixture	ID_Compound	Name of Chromato	Programme
365	30/07/2002	367	2	Bloc 2+ Er2O3	120
366	30/07/2002	360	2	Bloc 2+ Rh/C	120
367	30/07/2002	369	2	Bloc 2+ Ir/CaCO3	120
368	30/07/2002	398	2	Bloc 2+ Pd/CaCO3	120
369	30/07/2002	421	2	Bloc 2+ Ni/Raney	120
370	30/07/2002	392	2	Bloc 2+ Pd/CaCO3.Pb	120
371	30/07/2002	373	2	Bloc 2+ Tungstène	120
372	30/07/2002	374	1	Bloc 1+ Rh/Al2O3	120
373	30/07/2002	398	1	Bloc 1+ Pd/CaCO3	120
374	30/07/2002	360	1	Bloc 1+ Rh/C	120
375	30/07/2002	421	1	Bloc 1+ Ni/Raney	120
376	30/07/2002	369	1	Bloc 1+ Ir/CaCO3	120

FIG.9

5e

Signal					
ID_Signal	ID_Chromato	ID_Compound	Retention Time	Yield	Area
766	363	2	14,18	99,32	30 837 520,00
767	363	8	14,22	0,68	212 537,00
768	364	17	13,55	0,49	242 023,00
769	364	17	13,60	0,78	386 954,00
770	364	17	16,65	1,43	707 243,00
771	364	2	13,94	0,55	272 790,00
772	364	2	14,18	72,67	35 921 440,00
773	364	8	14,28	22,74	11 243 230,00
774	364	8	14,37	1,33	657 996,00
775	365	2	14,23	99,04	35 814 740,00
776	365	8	14,26	0,96	347 937,00

FIG.10

4 / 8

5d

Chromato					
ID	Date de l'injection	ID_Mélange	ID_Composé	Type de Chromato	Programme
365	30/07/2002	367	2	Bloc 2+ Er2O3	120
366	30/07/2002	360	2	Bloc 2+ Rh/C	120
367	30/07/2002	369	2	Bloc 2+ Ir/CaCO3	120
368	30/07/2002	398	2	Bloc 2+ Pd/CaCO3	120
369	30/07/2002	421	2	Bloc 2+ Ni/Raney	120
370	30/07/2002	392	2	Bloc 2+ Pd/CaCO3.Pb	120
371	30/07/2002	373	2	Bloc 2+ Tungstène	120
372	30/07/2002	374	1	Bloc 1+ Rh/Al2O3	120
373	30/07/2002	398	1	Bloc 1+ Pd/CaCO3	120
374	30/07/2002	360	1	Bloc 1+ Rh/C	120
375	30/07/2002	421	1	Bloc 1+ Ni/Raney	120
376	30/07/2002	369	1	Bloc 1+ Ir/CaCO3	120

FIG.9

5e

Signal					
ID_Signal	ID_Chromato	ID_Composé	Temps de Rétention	Rendement	Surface
766	363	2	14,18	99,32	30 837 520,00
767	363	8	14,22	0,68	212 537,00
768	364	17	13,55	0,49	242 023,00
769	364	17	13,60	0,78	386 954,00
770	364	17	16,65	1,43	707 243,00
771	364	2	13,94	0,55	272 790,00
772	364	2	14,18	72,67	35 921 440,00
773	364	8	14,28	22,74	11 243 230,00
774	364	8	14,37	1,33	657 996,00
775	365	2	14,23	99,04	35 814 740,00
776	365	8	14,26	0,96	347 937,00

FIG.10

5/8

RESULTAT							
Numéro	Champ1	Champ2	Champ3	Champ4	Champ5	Champ6	Champ7
10	EtOH + Acid ac	1	0		Bloc 1 + Rh/Al EtOH/Acide Acétique 5%	8	11,1111
11	EtOH + Acid ac	2	0		Bloc 1 + Rh/Al EtOH/Acide Acétique 5%	8	11,1111
12	EtOH + Acid ac	1	15,539	773706	Bloc 1 + MnO EtOH/Acide Acétique 5%	9	100
13	EtOH + Acid ac	1	15,396	204084	Bloc 1 + Rh/C EtOH/Acide Acétique 5%	10	17,6542183568093
14	EtOH + Acid ac	2	15,535	571439	Bloc 1 + Rh/C EtOH/Acide Acétique 5%	10	49,4321401167986
15	EtOH + Acid ac	3	15,836	380484	Bloc 1 + Rh/C EtOH/Acide Acétique 5%	10	32,9136415263921

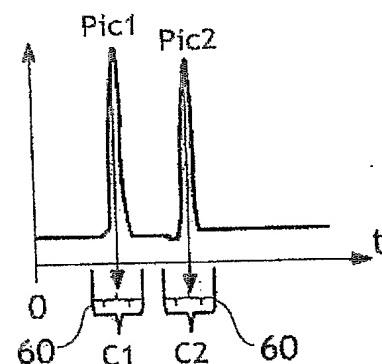
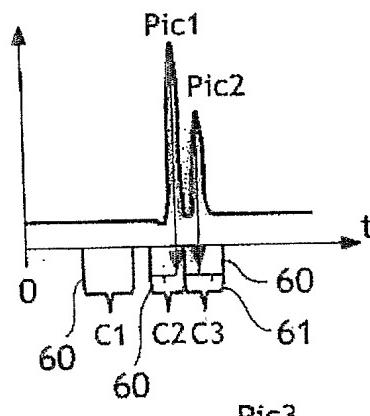
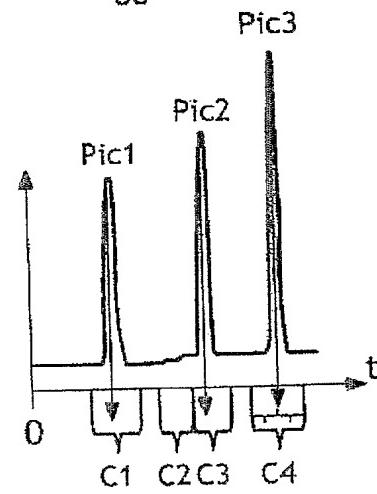
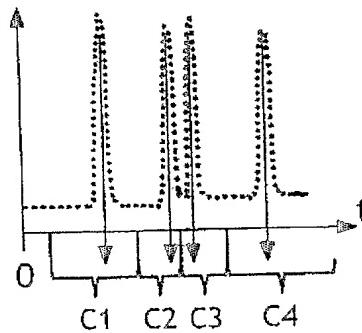
FIG.11

5 / 8

RESULTAT							
Numéro	Champ1	Champ2	Champ3	Champ4	Champ5	Champ6	Champ7
10	EtOH + Acid ac	1	0		Bloc 1 + Rh/Al EtOH/Acide Acétique 5%	8	11,1111
11	EtOH + Acid ac	2	0		Bloc 1 + Rh/Al EtOH/Acide Acétique 5%	8	11,1111
12	EtOH + Acid ac	1	15,539	773706	Bloc 1 + MnO EtOH/Acide Acétique 5%	9	100
13	EtOH + Acid ac	1	15,396	204084	Bloc 1 + Rh/C EtOH/Acide Acétique 5%	10	17,6542183568093
14	EtOH + Acid ac	2	15,535	571439	Bloc 1 + Rh/C EtOH/Acide Acétique 5%	10	49,4321401167986
15	EtOH + Acid ac	3	15,836	380484	Bloc 1 + Rh/C EtOH/Acide Acétique 5%	10	32,9136415263921

FIG\_11

6 / 8

FIG.12FIG.13FIG.14FIG.15

6 / 8

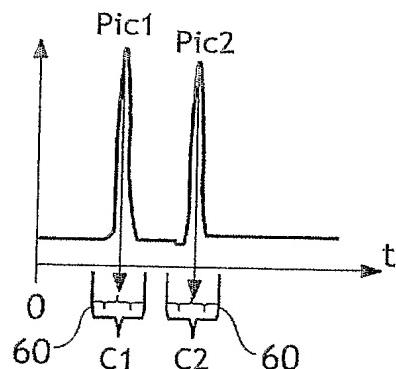


FIG.12

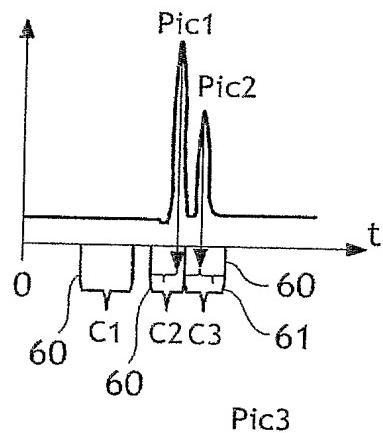


FIG.13

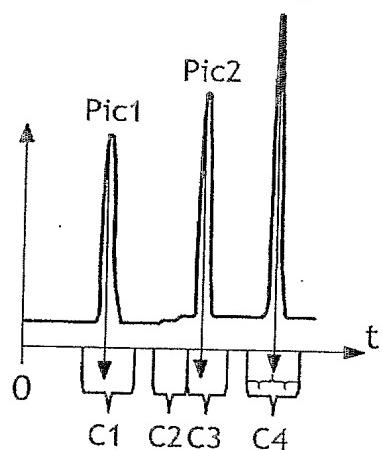


FIG.14

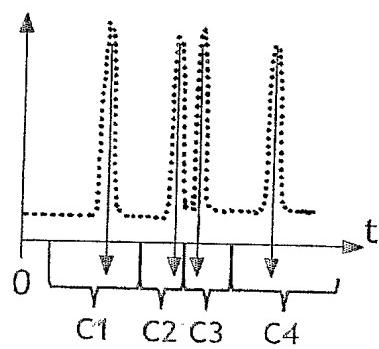
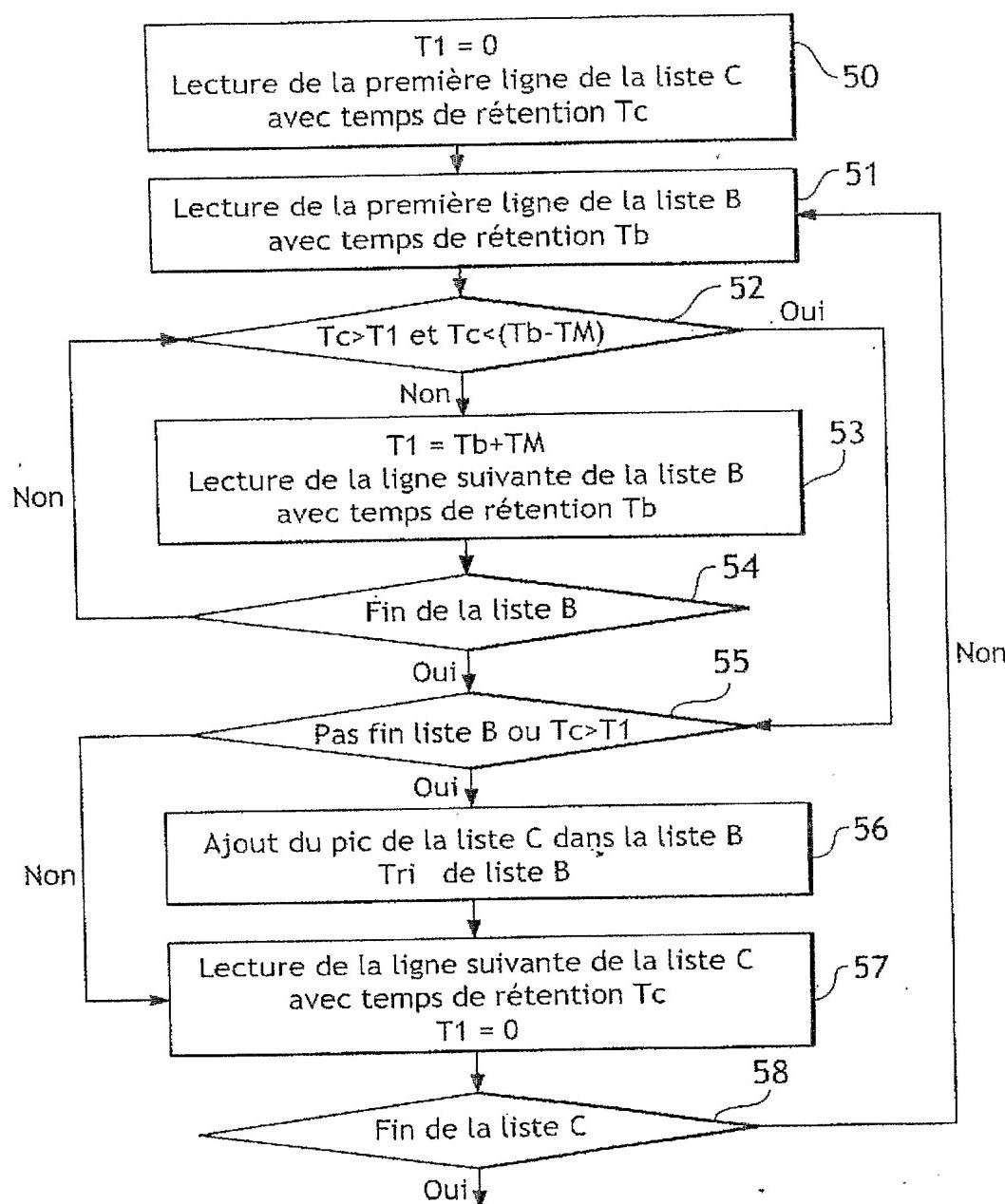
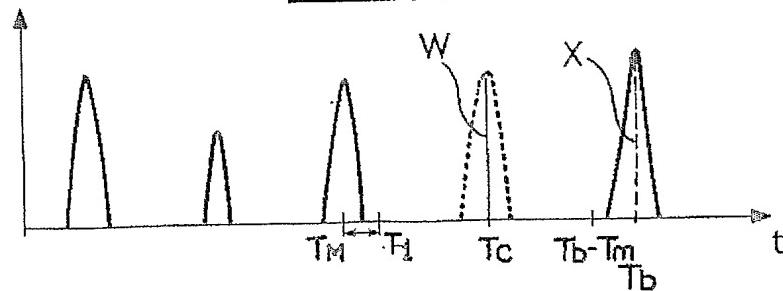
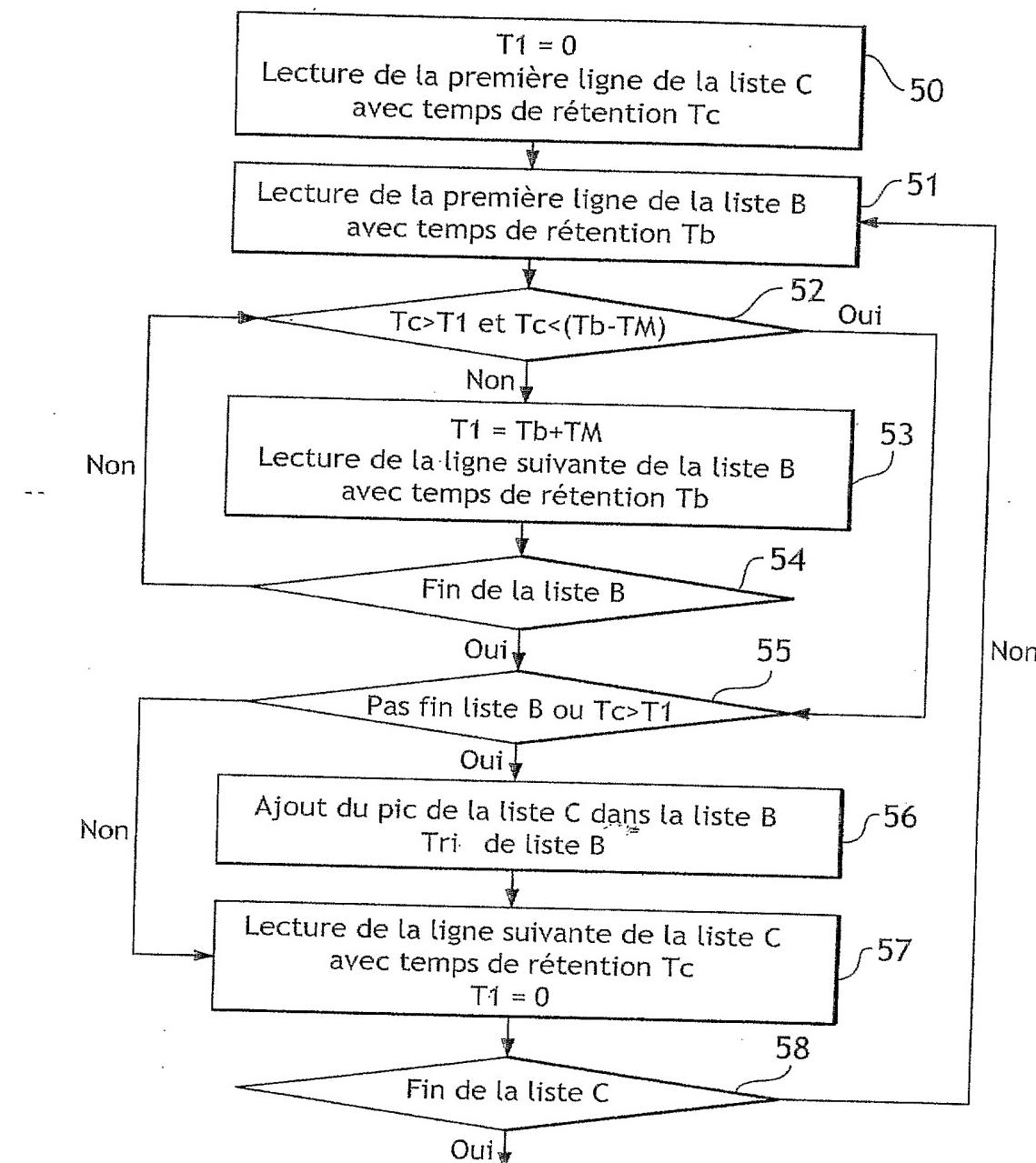
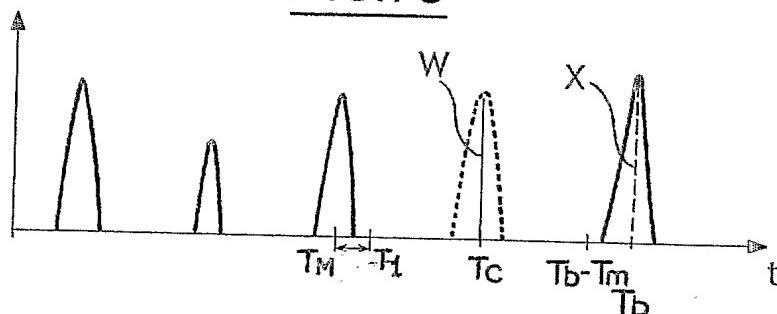


FIG.15

7 / 8

FIG.16FIG.17

7 / 8

FIG.16FIG.17

8/8

<b>Yield</b>	<b>Fct Group</b>	<sup>1<sup>er</sup></sup>	<b>Medium</b>	<b>Yield</b>	<b>Fct Group</b>	<sup>2<sup>d</sup></sup>
100,00	2	ArylKetone	2	355	99,40	2
99,40	2	1-Alkylalcen	2	355	100,00	2
100,00	1	Arom-N-O	1	356	5,28	1
100,00	2	Arylimin	1	356	94,72	1
100,00	1	Arom-N-O	1	356	100,00	2
100,00	1	Arylbromin	0	356	100,00	2
100,00	2	Arylimin	1	356	100,00	2
100,00	2	1-Alkylalcen	1	356	5,28	1
5,28	1	Aryliodim	0	356	100,00	2
100,00	2	3-Alkylalcen	2	356	5,28	1
100,00	2	ArylKetone	2	356	100,00	2
100,00	2	Arylimin	1	356	5,28	1
100,00	2	ArylKetone	2	356	100,00	2
100,00	2	ArylKetone	2	356	94,72	1
100,00	2	3-Alkylalcen	2	356	94,72	1
100,00	1	Arom-N-O	1	356	94,72	1
100,00	1	Arylbromin	0	356	94,72	1
100,00	2	ArylKetone	2	356	5,28	1
100,00	2	Arylimin	1	356	100,00	2
100,00	2	Arylimin	1	356	100,00	2
100,00	1	Arylbromin	0	356	100,00	2
100,00	1	Arom-N-O	1	356	100,00	2
94,72	1	Aryliodim	1	356	100,00	2
5,28	1	Aryliodim	0	356	100,00	2
94,72	1	Aryliodim	1	356	100,00	2
100,00	2	1-Alkylalcen	1	356	100,00	2
100,00	2	1-Alkylalcen	1	356	94,72	1
100,00	1	Arylbromin	0	356	100,00	2
100,00	1	Arom-N-O	1	356	100,00	2

**FIG. 18**

<b>Yield</b>	<b>Fct Group</b>	<sup>1<sup>er</sup></sup>	<b>Medium</b>	<b>Yield</b>	<b>Fct Group</b>	<sup>2<sup>d</sup></sup>
100,00	1	Arylbromin	0	356	100,00	2
100,00	1	Arylbromin	0	391	96,36	2

**FIG. 19**

8 / 8

Rendement	1 <sup>er</sup> groupe fonctionnel	Milieu	Rendement	2 <sup>ème</sup> groupe fonctionnel
100,00	2 ArylKetone	2	355	99,40 1-Alkylalcen 2
99,40	2 1-Alkylalcen	2	355	100,00 ArylKetone 2
100,00	1 Arom-N-O	1	356	5,28 Aryliodim 0
100,00	2 Arylimin	1	356	94,72 Aryliodim 1
100,00	1 Arom-N-O	1	356	100,00 3-Alkylalcen 2
100,00	1 Arylbromin	0	356	100,00 3-Alkylalcen 2
100,00	2 Arylimin	1	356	100,00 3-Alkylalcen 2
100,00	2 1-Alkylalcen	1	356	5,28 Aryliodim 0
5,28	1 Aryliodim	0	356	100,00 3-Alkylalcen 2
100,00	2 3-Alkylalcen	2	356	5,28 Aryliodim 0
100,00	2 ArylKetone	2	356	100,00 3-Alkylalcen 2
100,00	2 Arylimin	1	356	5,28 Aryliodim 0
100,00	2 ArylKetone	2	356	100,00 1-Alkylalcen 1
100,00	2 ArylKetone	2	356	94,72 Aryliodim 1
100,00	2 3-Alkylalcen	2	356	94,72 Aryliodim 1
100,00	1 Arom-N-O	1	356	94,72 Aryliodim 1
100,00	1 Arylbromin	0	356	94,72 Aryliodim 1
100,00	2 ArylKetone	2	356	5,28 Aryliodim 0
100,00	2 Arylimin	1	356	100,00 1-Alkylalcen 1
100,00	2 Arylimin	1	356	100,00 ArylKetone 2
100,00	1 Arylbromin	0	356	100,00 ArylKetone 2
100,00	1 Arom-N-O	1	356	100,00 ArylKetone 2
94,72	1 Aryliodim	1	356	100,00 ArylKetone 2
5,28	1 Aryliodim	0	356	100,00 ArylKetone 2
94,72	1 Aryliodim	1	356	100,00 3-Alkylalcen 2
100,00	2 1-Alkylalcen	1	356	100,00 ArylKetone 2
100,00	2 1-Alkylalcen	1	356	94,72 Aryliodim 1
100,00	1 Arylbromin	0	356	100,00 1-Alkylalcen 1
100,00	1 Arom-N-O	1	356	100,00 1-Alkylalcen 1

FIG.18

Rendement	1 <sup>er</sup> groupe fonctionnel	Milieu	Rendement	2 <sup>ème</sup> groupe fonctionnel
100,00	1 Arylbromin	0	356	100,00 ArylKetone 2
100,00	1 Arylbromin	0	391	96,36 ArylKetone 2

FIG.19



26 bis, rue de Saint Pétersbourg - 75800 Paris Cedex 08

Pour vous informer : INPI DIRECT

**INPI Indigo** 0 825 83 85 87  
0,15 € TTC/min

Télécopie : 33 (0)1 53 04 52 65

**BREVET D'INVENTION****CERTIFICAT D'UTILITÉ**

Code de la propriété intellectuelle - Livre VI



N° 11235\*03

**DÉSIGNATION D'INVENTEUR(S)** Page N° 1.../1...

(À fournir dans le cas où les demandeurs et les inventeurs ne sont pas les mêmes personnes)

Cet imprimé est à remplir lisiblement à l'encre noire



DB J13 @ W / 210103

Vos références pour ce dossier (facultatif)	BR37729/CR/NV/cf
N° D'ENREGISTREMENT NATIONAL	04 50178

**TITRE DE L'INVENTION** (200 caractères ou espaces maximum)

Procédé permettant d'identifier rapidement un ou plusieurs catalyseurs utilisables pour la transformation d'un composé

**LE(S) DEMANDEUR(S) :**

NOVALYST DISCOVERY  
23 rue de Loess  
67000 STRASBOURG

**DESIGNE(NT) EN TANT QU'INVENTEUR(S) :**

1 Nom	WAGNER	
Prénoms	Alain	
Adresse	Rue	25 quai des Bateliers
	Code postal et ville	67000 STRASBOURG
Société d'appartenance (facultatif)		
2 Nom	CATALA	
Prénoms	Cédric	
Adresse	Rue	2 rue Bizet
	Code postal et ville	67450 MUNDOLSHEIM
Société d'appartenance (facultatif)		
3 Nom		
Prénoms		
Adresse	Rue	
	Code postal et ville	_____
Société d'appartenance (facultatif)		

S'il y a plus de trois inventeurs, utilisez plusieurs formulaires. Indiquez en haut à droite le N° de la page suivie du nombre de pages.

**DATE ET SIGNATURE(S)  
DU (DES) DEMANDEUR(S)  
OU DU MANDATAIRE  
(Nom et qualité du signataire)**

Paris, le 1er février 2005

François TANTY

N° 98-1001

PCT/FR2005/050054

